

FABIANA DE FÁTIMA GIACOMINI

**VERIFICAÇÃO DA FORMA DE APLICAR CONDIÇÕES DE CONTORNO EM
PROBLEMAS UNIDIMENSIONAIS COM O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFPR, na área de concentração Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos.

Orientador: Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi.

CURITIBA

2009

Giacomini, Fabiana de Fátima

Verificação da forma de aplicar condições de contorno em problemas unidimensionais com o método dos volumes finitos / Fabiana de Fátima Giacomini. - Curitiba, 2009.

169 f. : il., tab.

Orientador: Carlos Henrique Marchi

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

1. Método dos volumes finitos. 2. Análise de erros (Matemática) I. Marchi, Carlos Henrique. II. Título. III. Universidade Federal do Paraná.

CDD 518.25

TERMO DE APROVAÇÃO

FABIANA DE FÁTIMA GIACOMINI

VERIFICAÇÃO DA FORMA DE APLICAR CONDIÇÕES DE CONTORNO EM
PROBLEMAS UNIDIMENSIONAIS COM O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

Dissertação aprovada como requisito parcial à obtenção de grau de Mestre em Engenharia Mecânica, área de concentração Fenômenos de Transporte e Mecânica dos Sólidos, no Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Setor de Tecnologia da Universidade Federal do Paraná.

Banca Examinadora:


Prof.^a. Dr.^a. Viviana Cocco Mariani
PUC-PR


Prof. Dr. Luciano Kiyoshi Araki
UFPR


Prof. Dr. Carlos Henrique Marchi
UFPR/PG-MEC
Presidente

Curitiba, 14 de abril de 2009.

A Deus, pela presença constante em minha vida.

Aos meus amores, Marialva e Franciéli, pela compreensão e pelo apoio incessante ao longo deste percurso.

Ao verdadeiro amigo, Germano Liesch, pela confiança depositada em minha coragem e determinação.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Prof. Carlos Henrique Marchi, pela confiança, paciência e orientação na construção deste trabalho. Pelo modelo irrefutável de disciplina, organização e didática ao transmitir os conhecimentos com empenho e excelência. Pelo exemplo de honestidade, imparcialidade e coerência ao ser profissional e humano.

Agradeço aos amigos do Laboratório de Experimentação Numérica (LENA-1), pelo apoio, cumplicidade, dinamismo e otimismo ao desenvolver os trabalhos individuais, criar parcerias, idealizar metas e atingir objetivos. Atuando sempre com muita responsabilidade e satisfação perante as dificuldades cotidianas. Aos amigos e colegas dos programas de Pós-Graduação que também estiveram presentes nesta caminhada.

Meus sinceros agradecimentos aos professores que fizeram parte desta trajetória, pois os seus ensinamentos presenciam a composição deste empreendimento. Aos secretários Márcio (PG-MEC) e Maristela (PPGMNE), pela compreensão e colaboração ao fornecer os subsídios necessários para o desenvolvimento diplomático do trabalho.

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo financiamento deste trabalho. Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PG-MEC), pela estrutura física e disponibilidade de equipamentos (hardware e software) com assistência técnica especializada.

Finalmente, agradeço aos membros da banca Dr. Luciano Kiyoshi Araki e Dra. Viviana Cocco Mariani, pelo tempo investido na leitura deste trabalho, pelas apreciações teóricas e estéticas e, pelas sugestões indicadas ao fechamento da dissertação.

RESUMO

O enfoque deste trabalho é verificar o efeito sobre o erro de discretização e sua ordem causado pela forma de aplicar as condições de contorno, em problemas resolvidos com o método dos volumes finitos. Para tanto, são considerados: equações de Poisson, advecção-difusão e Burgers; domínio unidimensional; malhas uniformes; sete variáveis de interesse com aproximações numéricas de primeira e segunda ordens de acurácia; condições de contorno de Dirichlet; *solver* tridiagonal; malhas com até milhões de nós; precisão quádrupla; e número de iterações suficiente para atingir o erro de arredondamento de máquina. As formas de aplicar as condições de contorno consideradas são quatro: sem e com volume fictício; meio-volume; e volume de espessura zero. As variáveis de interesse são: variável obtida em $x=1/2$; variável média; média da norma; e derivada de primeira ordem. A principal conclusão é que a forma de aplicar condições de contorno com meio-volume resulta, em geral, no menor erro numérico. Além disso, constatou-se a influência do efeito advectivo presente nas equações de advecção-difusão e Burgers. Finalmente, verificou-se que ao erro de truncamento está implícito o conceito de erro de poluição, que degenerou a ordem do erro numérico da derivada de primeira ordem, dos três problemas estudados com as formas sem e com volume fictício e volume de espessura zero.

Palavras-chave: Dinâmica dos fluidos computacional. Método dos volumes finitos. Formas de aplicar condições de contorno. Erro de discretização. Ordem do erro.

ABSTRACT

The focus of this work is the verification of the effect on the error discretization and its order caused by the boundary conditions application methodology, in problems solved with the finite volume method. In order to do this, the following aspects are considered: the Poisson, the advection-diffusion and the Burgers equations; one-dimensional domain; uniform grids; seven variables of interest with numerical interpolation schemes of first and second accuracy order; Dirichlet boundary conditions; tridiagonal *solver*; grids with up to millions of volumes; quadruple precision; and a number of iterations large enough to reach the machine round-off error. The boundary condition application methodologies considered are four: without and with ghost volumes; half-volume; and volume of zero thickness. The variables of interest are: the primary variable obtained in $x = 1/2$; the average of the primary variable; the norm average; and the first order derivative. The main result is the fact that the half-volume boundary condition methodology had the smallest numeric error. Besides, the influence of the presence of the advective effect was verified in the advection-diffusion and the Burgers equations. Finally, it was verified that the concept of pollution error is implicit at the round-off error, which changed the order of the numeric error of the first order derivative, of the three studied problems: without and with ghost volumes and with volume of zero thickness.

Keywords: Computational fluid dynamics. Finite volume method. Boundary conditions application methodologies. Discretization error. Error order.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1: Métodos de solução de problemas de engenharia (adaptada de Marchi, 2001)	25
Figura 2.1: Malha 1D com volumes uniformes.....	32
Figura 2.2: Condições de contorno com volumes inteiros (Maliska, 1995)	35
Figura 2.3: Condições de contorno com volumes fictícios (Maliska, 1995)	35
Figura 2.4: Condições de contorno com meio-volume (Maliska, 1995)	37
Figura 2.5: Condições de contorno com volume de espessura zero	38
Figura 2.6: Refino uniforme em malha de face centrada entre volumes (Schneider, 2007)....	39
Figura 2.7: Regra do retângulo	43
Figura 2.8: Regra do trapézio	44
Figura 4.1: Comparação do erro das variáveis de interesse (T_{nod}) e (T_{med}) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício	79
Figura 4.2: Comparação do erro das variáveis de interesse ($T_{m,ret}$) e ($T_{m,trap}$) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício.....	79
Figura 4.3: Comparação do erro das variáveis de interesse (I_{DDS}) e (I_{DDS-2}) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício.....	80
Figura 4.4: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício.....	80
Figura 4.5: Comparação do erro da variável de interesse (T_{nod}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	82
Figura 4.6: Comparação do erro da variável de interesse (T_{med}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	82
Figura 4.7: Comparação do erro da variável de interesse ($T_{m,ret}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	82
Figura 4.8: Comparação do erro da variável de interesse ($T_{m,trap}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	82
Figura 4.9: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	83

Figura 4.10: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	83
Figura 4.11: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS-2}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	83
Figura 4.12: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{nod}) com as integrações analítica e regra do retângulo	85
Figura 4.13: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{med}) com as integrações analítica e regra do retângulo.....	85
Figura 4.14: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,ret}$) com as integrações analítica e regra do retângulo	85
Figura 4.15: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,trap}$) com as integrações analítica e regra do retângulo.....	85
Figura 4.16: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com as integrações analítica e regra do retângulo.....	86
Figura 4.17: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS}) com as integrações analítica e regra do retângulo	86
Figura 4.18: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com as integrações analítica e regra do retângulo	86
Figura 4.19: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS}) com a forma de aplicar condições de contorno com meio-volume	87
Figura 4.20: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma de aplicar condições de contorno com meio-volume ...	87
Figura 4.21: Posicionamento face/volume para as formas sem e com volume fictício e com volume de espessura zero (à esquerda = DDS; à direita = DDS-2).....	89
Figura 4.22: Posicionamento volume/face para a forma com meio-volume (à esquerda = DDS; à direita = DDS-2)	89
Figura 4.23: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS}) com solução analítica e numérica	91
Figura 4.24: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com solução analítica e numérica.....	91

Figura 5.1: Comparação do erro da variável de interesse (T_{nod}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	94
Figura 5.2: Comparação do erro da variável de interesse ($T_{m,ret}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	94
Figura 5.3: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	95
Figura 5.4: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS-2}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	95
Figura 5.5: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{nod}) com a forma com volume fictício	97
Figura 5.6: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{nod}) com a forma com meio-volume	97
Figura 5.7: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,ret}$) com a forma com volume fictício	97
Figura 5.8: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,ret}$) com a forma com meio-volume	97
Figura 5.9: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com volume fictício	98
Figura 5.10: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com meio-volume	98
Figura 5.11: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com volume de espessura zero	98
Figura 5.12: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com volume fictício	99
Figura 5.13: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com meio-volume	99
Figura 6.1: Comparação do erro da variável de interesse (u_{nod}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	102
Figura 6.2: Comparação do erro da variável de interesse ($u_{m,ret}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	102

Figura 6.3: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	102
Figura 6.4: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS-2}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	102
Figura 6.5: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (u_{nod}) com a forma com volume fictício.....	103
Figura 6.6: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (u_{nod}) com a forma com meio-volume.....	103
Figura 6.7: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($u_{m,ret}$) com a forma com volume fictício.....	104
Figura 6.8: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($u_{m,ret}$) com a forma com meio-volume	104
Figura 6.9: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com volume fictício	104
Figura 6.10: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com meio-volume	104
Figura 6.11: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com volume fictício	105
Figura 6.12: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com meio-volume	105

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1: Resultados analíticos para as variáveis de interesse.....	62
Tabela 3.2: Valores constantes das propriedades dos modelos matemáticos	63
Tabela 3.3: Resultados obtidos <i>a priori</i> das sete variáveis de interesse	72
Tabela 3.4: Simbologia atribuída às variáveis de interesse.....	74
Tabela 4.1: Malha, tamanho e número de volumes de controle empregados com as formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício	78
Tabela 4.2: Malha, tamanho e número de volumes de controle empregados com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume	79
Tabela 4.3: Malha, tamanho e número de volumes de controle empregados com a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero	80
Tabela 4.4: Classificação das variáveis de interesse para as quatro formas de aplicar as condições de contorno.....	84
Tabela 4.5: Resultados obtidos <i>a priori</i> e <i>a posteriori</i> das sete variáveis de interesse	88
Tabela 5.1: Malha, tamanho e número de volumes de controle empregados com as formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício	93
Tabela 5.2: Malha, tamanho e número de volumes de controle empregados com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume	93
Tabela 5.3: Malha, tamanho e número de volumes de controle empregados com a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero	94
Tabela 5.4: Classificação das variáveis de interesse para as quatro formas de aplicar as condições de contorno.....	95
Tabela 5.5: Resultados obtidos <i>a priori</i> e <i>a posteriori</i> das quatro variáveis de interesse.....	99
Tabela C.1: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado analiticamente ..	129
Tabela C.2: Identificação das simulações para volumes pares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado analiticamente ..	130
Tabela C.3: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado numericamente .	130
Tabela C.4: Identificação das simulações para volumes pares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado numericamente .	131

Tabela C.5: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício e termo fonte integrado numericamente .	131
Tabela C.6: Identificação das simulações para volumes pares com a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício e termo fonte integrado numericamente .	132
Tabela C.7: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume e termo fonte integrado numericamente....	133
Tabela C.8: Identificação das simulações para volumes pares com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume e termo fonte integrado numericamente....	133
Tabela C.9: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma com volume de espessura zero e termo fonte integrado numericamente	134
Tabela C.10: Identificação das simulações para volumes pares com a forma com volume de espessura zero e termo fonte integrado numericamente	134
Tabela C.11: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício.....	135
Tabela C.12: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício	135
Tabela C.13: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume.....	136
Tabela C.14: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero.....	136
Tabela C.15: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado numericamente .	137
Tabela C.16: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício e termo fonte integrado numericamente .	138
Tabela C.17: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume e termo fonte integrado numericamente....	138
Tabela C.18: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma com volume de espessura zero e termo fonte integrado numericamente	139
Tabela E.1: Comparação do erro das variáveis de interesse (T_{nod}) e (T_{med}) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício.....	144
Tabela E.2: Comparação do erro das variáveis de interesse ($T_{m,ret}$) e ($T_{m,trap}$) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício.....	145

Tabela E.3: Comparação do erro das variáveis de interesse (I_{DDS}) e (I_{DDS-2}) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício.....	145
Tabela E.4: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício.....	146
Tabela E.5: Comparação do erro da variável de interesse (T_{nod}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	146
Tabela E.6: Comparação do erro da variável de interesse (T_{med}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	147
Tabela E.7: Comparação do erro da variável de interesse ($T_{m,ret}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	147
Tabela E.8: Comparação do erro da variável de interesse ($T_{m,trap}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	148
Tabela E.9: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	148
Tabela E.10: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	149
Tabela E.11: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS-2}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	149
Tabela E.12: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{nod}) com as integrações analítica e regra do retângulo	150
Tabela E.13: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{med}) com as integrações analítica e regra do retângulo.....	150
Tabela E.14: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,ret}$) com as integrações analítica e regra do retângulo	151
Tabela E.15: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,trap}$) com as integrações analítica e regra do retângulo.....	151
Tabela E.16: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com as integrações analítica e regra do retângulo.....	152
Tabela E.17: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS}) com as integrações analítica e regra do retângulo	152

Tabela E.18: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com as integrações analítica e regra do retângulo	153
Tabela E.19: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS}) com a forma de aplicar condições de contorno com meio-volume ...	153
Tabela E.20: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma de aplicar condições de contorno com meio-volume.	154
Tabela E.21: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS}) com solução analítica e numérica	154
Tabela E.22: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com solução analítica e numérica.....	155
Tabela F.1: Comparação do erro da variável de interesse (T_{nod}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	156
Tabela F.2: Comparação do erro da variável de interesse ($T_{m,ret}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	157
Tabela F.3: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	157
Tabela F.4: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS-2}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	158
Tabela F.5: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{nod}) com a forma com volume fictício.....	158
Tabela F.6: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{nod}) com a forma com meio-volume.....	159
Tabela F.7: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,ret}$) com a forma com volume fictício.....	159
Tabela F.8: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,ret}$) com a forma com meio-volume.....	160
Tabela F.9: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com volume fictício	160
Tabela F.10: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com meio-volume	161

Tabela F.11: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com volume de espessura zero	161
Tabela F.12: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com volume fictício	162
Tabela F.13: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com meio-volume	162
Tabela G.1: Comparação do erro da variável de interesse (u_{nod}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	163
Tabela G.2: Comparação do erro da variável de interesse ($u_{m,ret}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	164
Tabela G.3: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	164
Tabela G.4: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS-2}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno	165
Tabela G.5: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (u_{nod}) com a forma com volume fictício.....	165
Tabela G.6: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (u_{nod}) com a forma com meio-volume.....	166
Tabela G.7: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($u_{m,ret}$) com a forma com volume fictício.....	166
Tabela G.8: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($u_{m,ret}$) com a forma com meio-volume	167
Tabela G.9: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com volume fictício	167
Tabela G.10: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com meio-volume	168
Tabela G.11: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com volume fictício	168
Tabela G.12: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com meio-volume	169

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADI	<i>Alternating Direction Implicit</i>
CDS-2	<i>Central Differencing Scheme</i> de 2ª ordem
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i> ou Dinâmica dos Fluidos Computacional
DDS	<i>Downstream Differencing Scheme</i>
DDS-2	<i>Downstream Differencing Scheme</i> de 2ª ordem
Eq.	Equação
Fig.	Figura
GB	Unidade de medida da informação na memória (GigaByte)
GHz	Velocidade do processador (GigaHertz)
LENA	Laboratório de Experimentação Numérica
MB	Unidade de medida da informação na memória (MegaByte)
MVF	Método dos Volumes Finitos
RA	Refino Aleatório
RAM	<i>Random Access Memory</i>
RC	Refino entre Centros
RCF	Refino entre Centros com o fator geométrico constante
RU	Refino Uniforme
RSU	Refino Semi-Uniforme
Tab.	Tabela
TDMA	<i>Thomas Algorithm</i> ou <i>Tridiagonal Matrix Algorithm</i>
UDS	<i>Upstream Differencing Scheme</i>
UFPR	Universidade Federal do Paraná
VC	Volume de Controle
VFC	Volume de face centrada
VNC	Volume de nó centrado

LISTA DE SÍMBOLOS

A	área considerada para o cálculo
a_e	coeficiente leste do volume de controle principal
a_p	coeficiente do volume de controle principal
a_w	coeficiente oeste do volume de controle principal
b_p	coeficiente do termo fonte do volume de controle principal
C	constante para equação de Poisson [adimensional]
c_i	coeficiente geral da equação do erro numérico
C_E	coeficiente geral para equação da ordem efetiva
c_p	calor específico do material [J/kg.K]
dA	elemento de área
dV	elemento de volume
e	face leste do volume de controle principal
E	volume de controle leste
$E(\phi)$	erro de discretização
F_w	fator geométrico para face oeste
F_e	fator geométrico para face leste
i	número do volume de controle da malha computacional
I	inclinação da propriedade
k	condutividade térmica do material [W/m.K]
K_U	coeficiente geral para equação da ordem aparente
L	comprimento do domínio de cálculo [m]
l_1	norma utilizada para obter o resíduo
$\bar{l}_1(Eh)$	média da norma do erro de discretização
M	número de malhas
\hat{n}	vetor unitário normal a cada ponto diferencial da área
N	número de volumes de controle

N_f	número de volumes na malha fina
N_g	número de volumes na malha grossa
P	volume de controle principal
Pe	número de Peclet para equação de advecção-difusão [adimensional]
pE	ordem efetiva do erro numérico [adimensional]
pL	ordem assintótica do erro numérico [adimensional]
pV	ordem verdadeira do erro numérico [adimensional]
pU	ordem aparente do erro numérico [adimensional]
q	razão de refino da malha [adimensional]
Re	número de Reynolds para equação de Burgers [adimensional]
S	termo fonte para as equações de Poisson e Burgers
S_ϕ	termo fonte da propriedade genérica
T	Temperatura [K]
$t1$	tempo inicial de cálculo [s]
$t2$	tempo final de cálculo [s]
u	velocidade unidimensional [m/s]
U	erro numérico estimado
U_{RI}	erro estimado pelo estimador de Richardson
\vec{V}	vetor velocidade [m/s]
x	coordenada espacial unidimensional [m]
w	face oeste do volume de controle principal
w_i	pesos que multiplicam a função na fórmula de integração
W	volume de controle oeste

Letras gregas

α	difusividade térmica do material [m ² /s]
β	parâmetro que efetiva o emprego da correção adiada
Γ	coeficiente de transporte da propriedade
Δx	tamanho do volume de controle [m]

Δx_c	distância do contorno ao centro do volume de controle adjacente [m]
Δx_e	distância da face leste entre os volumes principal e leste [m]
Δx_p	tamanho do volume de controle principal [m]
Δx_w	distância da face oeste entre os volumes oeste e principal [m]
Δx_f	tamanho do volume de controle na malha fina [m]
Δx_g	tamanho do volume de controle na malha grossa [m]
Δx_{sg}	tamanho do volume de controle na malha supergrossa [m]
ε_τ	erro de truncamento
ε_n	erro de iteração
ε_π	erro de arredondamento
ε_p	erro de programação
μ	viscosidade absoluta do fluido [kg/s.m]
ρ	massa específica da propriedade [kg/m ³]
Σ	somatório dos volumes de controle
ϕ	solução numérica da propriedade de interesse
ϕ_A	solução no contorno esquerdo
ϕ_B	solução no contorno direito
ϕ_c	solução numérica para o contorno fixo ou constante
ϕ_e	solução numérica obtida na face leste do volume de controle principal
ϕ_E	solução numérica obtida no volume de controle leste
ϕ_{face}	solução numérica obtida em uma face genérica
$\phi_{face,UDS}$	solução numérica obtida em uma face genérica com o esquema UDS
$\phi_{face,UDS}^*$	solução numérica da iteração anterior obtida em uma face genérica com o esquema UDS
$\phi_{face,CDS-2}^*$	solução numérica da iteração anterior obtida em uma face genérica com o esquema CDS-2
ϕ_p	solução numérica obtida no volume de controle principal
$\phi_{p,k}$	solução numérica obtida no volume principal em uma determinada iteração
$\phi_{p,k \rightarrow \infty}$	solução numérica exata das equações discretizadas

ϕ_w	solução numérica obtida na face oeste do volume de controle principal
ϕ_W	solução numérica obtida no volume de controle oeste
ϕ_∞	solução analítica estimada
ϕ_f	solução numérica obtida na malha fina
ϕ_g	solução numérica obtida na malha grossa
ϕ_{sg}	solução numérica obtida na malha supergrossa
ϕ^2	solução numérica da propriedade não-linear
$\overline{\phi}$	média da propriedade de interesse
ϕ^*	solução numérica conhecida pela iteração anterior
$\phi(x)$	solução numérica ao longo da coordenada espacial unidimensional
$\phi(x_i)$	solução numérica em pontos específicos do domínio para regra do trapézio
$\phi(x_i^*)$	solução numérica em pontos específicos do domínio para regra do retângulo
Φ	solução analítica da variável de interesse

Operadores

$\vec{\nabla}$	operador vetorial nabla
$\vec{\nabla} \phi$	gradiente da propriedade
$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{V}$	divergente da propriedade

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	24
1.1	DEFINIÇÃO DO PROBLEMA.....	24
1.2	RELEVÂNCIA DO PROBLEMA.....	27
1.3	OBJETIVOS DO TRABALHO	28
1.4	DELINEAMENTO DA DISSERTAÇÃO	28
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	30
2.1	MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS	30
2.2	TIPO DE CONDIÇÃO DE CONTORNO	33
2.3	FORMAS DE APLICAR CONDIÇÕES DE CONTORNO	34
2.3.1	Condições de Contorno Aplicadas Sem Volume Fictício	34
2.3.2	Condições de Contorno Aplicadas Com Volume Fictício.....	35
2.3.3	Condições de Contorno Aplicadas Com Meio-Volume	36
2.3.4	Condições de Contorno Aplicadas Com Volume de Espessura Zero	37
2.4	REFINO DA MALHA COMPUTACIONAL.....	38
2.5	FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO.....	39
2.5.1	Funções de Interpolação para Termos Difusivos	40
2.5.2	Funções de Interpolação para Termos Advectivos.....	41
2.5.3	Correção Adiada para Termos Não-lineares	41
2.6	FUNÇÕES DE INTEGRAÇÃO	42
2.6.1	Integração pela Regra do Retângulo.....	43
2.6.2	Integração pela Regra do Trapézio.....	44
2.7	MÉTODO DIRETO DE SOLUÇÃO	44
2.8	VERIFICAÇÃO EM CFD.....	45
2.8.1	Fontes de Erros Numéricos	46
2.8.2	Estimativas de Erros <i>a Priori</i>	50
2.8.3	Estimativas de Erros <i>a Posteriori</i>	51
2.8.4	Ordens Efetiva e Aparente	51
3	PROCEDIMENTOS ANALÍTICOS E NUMÉRICOS	56
3.1	MODELOS MATEMÁTICOS	56
3.1.1	Equação de Poisson	57

3.1.2	Equação de Advecção-Difusão	58
3.1.3	Equação de Burgers	60
3.2	SOLUÇÕES ANALÍTICAS	61
3.3	MODELOS NUMÉRICOS	62
3.3.1	Condições de Contorno Aplicadas Sem Volume Fictício	65
3.3.2	Condições de Contorno Aplicadas Com Volume Fictício.....	67
3.3.3	Condições de Contorno Aplicadas Com Meio-Volume	68
3.3.4	Condições de Contorno Aplicadas Com Volume de Espessura Zero	70
3.3.5	Análise <i>a Priori</i> da Ordem do Erro Numérico.....	72
3.4	SOLUÇÃO NUMÉRICA	74
4	RESULTADOS SOBRE A EQUAÇÃO DE POISSON.....	77
4.1	ERROS NUMÉRICOS DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE	77
4.2	ORDENS ASSINTÓTICA, EFETIVA E APARENTE.....	84
5	RESULTADOS SOBRE A EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO.....	92
5.1	ERROS NUMÉRICOS DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE	92
5.2	ORDENS ASSINTÓTICA, EFETIVA E APARENTE.....	96
6	RESULTADOS SOBRE A EQUAÇÃO DE BURGERS	101
6.1	ERROS NUMÉRICOS DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE	101
6.2	ORDENS ASSINTÓTICA, EFETIVA E APARENTE.....	103
7	CONCLUSÃO.....	107
7.1	CONSTATAÇÕES GERAIS.....	107
7.2	CONTRIBUIÇÕES	108
7.3	TRABALHOS FUTUROS	109
	REFERÊNCIAS.....	110
	APÊNDICE A. Obtenção das estimativas de erros <i>a priori</i>.....	113
	APÊNDICE B. Coeficientes e termos fontes das equações governantes	118
	EQUAÇÃO DE POISSON	118
	Condições de Contorno Aplicadas Sem Volume Fictício	118
	Condições de Contorno Aplicadas Com Volume Fictício.....	120
	- Termo Fonte Integrado Analiticamente	120
	- Termo Fonte Integrado pela Regra do Retângulo.....	121
	Condições de Contorno Aplicadas Com Meio-Volume.....	121

Condições de Contorno Aplicadas Com Volume de Espessura Zero	122
EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO	123
Condições de Contorno Aplicadas Sem Volume Fictício	123
Condições de Contorno Aplicadas Com Volume Fictício.....	124
Condições de Contorno Aplicadas Com Meio-Volume.....	124
Condições de Contorno Aplicadas Com Volume de Espessura Zero	125
EQUAÇÃO DE BURGERS.....	126
Condições de Contorno Aplicadas Sem Volume Fictício	126
Condições de Contorno Aplicadas Com Volume Fictício.....	127
Condições de Contorno Aplicadas Com Meio-Volume.....	127
Condições de Contorno Aplicadas Com Volume de Espessura Zero	128
APÊNDICE C. Identificação das simulações computacionais	129
EQUAÇÃO DE POISSON	129
EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO	135
EQUAÇÃO DE BURGERS.....	137
APÊNDICE D. Análise dos coeficientes das formas de aplicar condições de contorno 140	
CONDIÇÕES DE CONTORNO SEM VOLUME FICTÍCIO	140
CONDIÇÕES DE CONTORNO COM VOLUME FICTÍCIO	141
CONDIÇÕES DE CONTORNO COM MEIO-VOLUME.....	142
CONDIÇÕES DE CONTORNO COM VOLUME DE ESPESSURA ZERO	143
APÊNDICE E. Tabelas do capítulo 4: Equação de Poisson	144
APÊNDICE F. Tabelas do capítulo 5: Equação de Advecção-Difusão	156
APÊNDICE G. Tabelas do capítulo 6: Equação de Burgers.....	163

1 INTRODUÇÃO

Este capítulo compreende uma apresentação global da dissertação. Aborda algumas generalidades em dinâmica dos fluidos computacional (CFD), como os métodos empregados na resolução dos problemas de engenharia; a definição dos problemas, abordando as equações governantes, o tipo de condição de contorno e as formas de aplicar as condições de contorno; a relevância do estudo dos problemas, assim como a importância em verificar e estimar erros numéricos; os objetivos do trabalho e o delineamento da dissertação.

1.1 DEFINIÇÃO DO PROBLEMA

Os problemas existentes na área de engenharia são abordados através dos séculos. Primeiramente observando o comportamento dos fenômenos reais, provenientes da natureza e, ao passar os anos, com as técnicas de estudo aprimoradas, incorporando o estudo dos métodos teóricos. Os métodos empregados na solução dos problemas de engenharia foram divididos em três tipos: experimentais, causados pelos fenômenos reais; analíticos e numéricos, causados pelos métodos teóricos (TANNEHILL *et al.*, 1997).

Os métodos experimentais, que foram divulgados no século XVII com os trabalhos de Galileu Galilei sobre o movimento dos corpos, têm a vantagem de trabalhar com o fenômeno real, pois é produzido um modelo em escala e testado em laboratório. Porém, possui algumas desvantagens: alto custo operacional para reprodução dos modelos; dificuldades para medição das grandezas de interesse, que ocasionam erros experimentais; e equipamentos exigidos.

Os métodos analíticos, foram divulgados também no século XVII, com o livro *Principia* (1687) de Isaac Newton, que formulou as três leis do movimento e realizou estudos sobre a gravitação e a luz. Os métodos analíticos têm a vantagem de representar o fenômeno real por meio de um modelo matemático. Porém, traz desvantagens como: restrição da geometria de cálculo; problemas simples e lineares e apresentam erros de modelagem.

Os métodos numéricos foram divulgados com o trabalho de Richardson em 1910 (ROACHE, 1972), que mesmo antes do computador digital, resolveu a equação de difusão de calor bidimensional de Laplace (INCROPERA e DeWITT, 2003). A trajetória da evolução científica juntamente com a invenção dos computadores digitais possibilitou a melhoria da

aplicação dos métodos numéricos. Estes métodos, além de representarem o fenômeno real por meio de modelos matemáticos, têm grandes vantagens em relação aos outros: a possibilidade para evolução temporal do processo de cálculo; emprego de problemas não-lineares; geometrias complicadas e condições de contornos variáveis. Assim como os métodos experimentais e analíticos, os métodos numéricos têm algumas desvantagens como: alto custo computacional; erros de modelagem do problema; erros numéricos, que são provenientes de quatro fontes (ROACHE, 1998; FERZIGER e PERIC, 2002; MARCHI e SILVA, 2002): erros de truncamento; erros de iteração; erros de arredondamento e erros de programação.

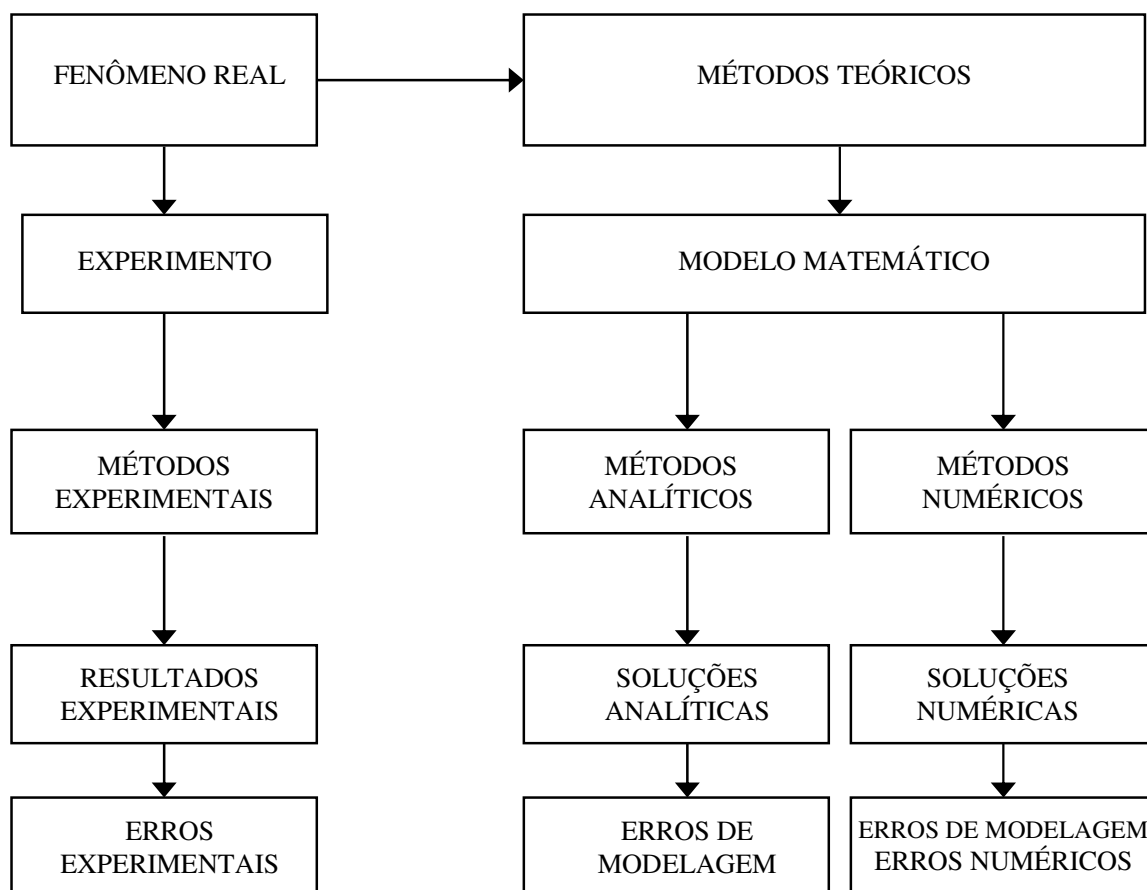


Figura 1.1: Métodos de solução de problemas de engenharia (adaptada de Marchi, 2001)

A Fig. 1.1 mostra o processo de solução dos problemas em engenharia de forma concisa e resumida, proporcionando a percepção visual da divisão dos métodos empregados em CFD e as etapas envolvidas em cada método.

Para incorporar os métodos numéricos na área da computação científica, foram desenvolvidas técnicas de discretização aplicadas nas equações diferenciais que representam o modelo matemático. Alguns métodos numéricos usados em CFD são: diferenças finitas

(TANNEHILL *et al.*, 1997), volumes finitos (PATANKAR, 1980; MALISKA, 1995; FERZIGER e PERIC, 2002; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007), elementos finitos (HUGHES, 2000) e elementos de contorno (BREBBIA *et al.*, 1984). Para o desenvolvimento desta dissertação, que discorre sobre as formas de aplicar condições de contorno em problemas difusivos e advectivos, será utilizado o método dos volumes finitos.

Na discretização do domínio de cálculo pelo método dos volumes finitos, serão empregadas as seguintes formas de aplicar as condições de contorno: sem volume fictício, com volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero, para condições de contorno de Dirichlet. As três equações governantes abordadas envolvem fenômenos como: difusão, advecção e não-linearidade, que serão representados por equações unidimensionais, em regime permanente e com propriedades constantes, conhecidas como equação de Poisson, equação de advecção-difusão e equação de Burgers.

A verificação das soluções numéricas é o processo que quantifica o erro numérico e seu objetivo é determinar em que medida um modelo matemático é resolvido adequadamente por meio de um método numérico. Segundo Marchi (2001) a verificação é necessária, pois a simples obtenção de uma solução numérica é insuficiente para garantir sua confiabilidade em função dos erros provenientes da utilização dos métodos numéricos, como mostra a Fig. 1.1. A verificação, neste trabalho, foi realizada para as soluções numéricas envolvendo as quatro formas de aplicar as condições de contorno empregadas nas três equações governantes dos modelos matemáticos.

As fontes de erros numéricos provenientes do método numérico são (MARCHI e SILVA, 2002): erro de truncamento (ε_τ); erro de iteração (ε_n); erro de arredondamento (ε_π) e erro de programação (ε_p). Quando a única fonte de erro da solução numérica é o erro de truncamento, o erro passa a denominar-se erro de discretização (OBERKAMPF e TRUCANO, 2002). A fonte de erro considerada neste trabalho foi o erro de discretização.

As estimativas dos erros são realizadas: *a priori*, estimando a ordem do erro de discretização e *a posteriori*, estimando a magnitude do erro de discretização (E). *A priori* são obtidas as ordens assintótica (pL) e verdadeiras (pV) do erro e *a posteriori* são obtidas a ordem efetiva (pE) e a ordem aparente (pU), esta última, calculada por meio de estimadores de erros.

1.2 RELEVÂNCIA DO PROBLEMA

Os problemas em CFD envolvendo fenômenos de mecânica dos fluidos e de transferência de calor por meio dos métodos numéricos, necessitam de uma expressão adequada para o domínio de cálculo, ou seja, um modelo numérico. O modelo numérico é expresso pelas equações diferenciais parciais e pelas condições de contorno e iniciais introduzidas ao modelo matemático. O problema físico disponibiliza alguns tipos de condições de contorno, porém neste trabalho foi utilizado o tipo de condição de contorno de Dirichlet, que segundo Bond *et al.* (2004), é uma condição de contorno que não necessita de uma verificação formal, pois é aplicada diretamente, não depende de fluxos ou de formulações de vetores residuais.

O método numérico dos volumes finitos disponibiliza, pelo menos, quatro formas pelas quais se aplicam as condições de contorno nas fronteiras dos problemas de engenharia (PATANKAR, 1980; MALISKA, 1995): sem volume fictício; com volume fictício; com meio-volume e com volume de espessura zero. Nesta dissertação foram estudadas as quatro formas de aplicar as condições de contorno, pois segundo Maliska (1995) um procedimento para aplicação das condições de contorno inconveniente, acarreta obstáculos que influenciam na veracidade da solução do problema.

Aplicando-se um método numérico a um modelo matemático que representa um fenômeno físico real, obtém-se uma solução numérica. Essa solução numérica contém um certo nível de erro que é causado pelo emprego de aproximações numéricas ao modelo matemático. Para Oberkampf e Trucano (2002), a estimativa quantitativa do erro numérico é um dever dos analistas de CFD. Como os processos de verificação e validação (AIAA, 1998; ROACHE, 2004) são os principais meios para avaliar a acurácia e a confiabilidade em simulações computacionais (MARCHI e SILVA, 1999), foi realizado neste trabalho uma conexão entre o processo de verificação e a forma de aplicação das condições de contorno.

Segundo Marchi (2001), a simples apresentação de resultados em gráficos visando comparar o desempenho entre modelos numéricos diferentes é insuficiente para concluir uma pesquisa, levando a divergência de opiniões e deduções equivocadas dos parâmetros empregados. Por isso, muitas revistas e sociedades profissionais têm implementado políticas projetadas para forçar padrões e contribuir para o estado-da-arte em verificação de soluções numéricas em CFD (ELSEVIER/C&F, 2005; ELSEVIER/JCP, 2006; AIAA, 2009; ASME/JFE, 2009).

1.3 OBJETIVOS DO TRABALHO

O objetivo geral deste trabalho é verificar o efeito da forma de aplicar condições de contorno, empregando o método dos volumes finitos em problemas unidimensionais que representam fenômenos de caráter difusivo e advectivo com equações lineares e não-lineares.

Os objetivos específicos deste trabalho são:

- deduzir *a priori* as ordens assintótica e verdadeiras do erro de discretização para sete variáveis de interesse;
- verificar a tendência do erro de discretização em função do número de volumes de controle;
- verificar *a posteriori* as ordens assintótica e verdadeiras do erro de discretização, por meio das ordens efetiva e aparente, em função do número de volumes para sete variáveis de interesse;
- comparar os erros de discretização e as ordens dos erros entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno.

1.4 DELINEAMENTO DA DISSERTAÇÃO

A dissertação apresenta sete capítulos, referências e apêndices constituídos da seguinte forma:

- O primeiro capítulo envolve a introdução do trabalho. Descreve a definição do problema; generalidades em CFD; generalidades em verificação e estimativas de erros; a relevância do problema; os objetivos do trabalho e o delineamento da dissertação.
- O segundo capítulo envolve a fundamentação teórica do trabalho. Descreve o método de discretização empregado no trabalho; o tipo de condição de contorno; as formas de aplicar as condições de contorno; o refino da malha computacional; as funções de interpolação; o método de solução direta empregado para obter a solução numérica; a verificação em CFD contendo as fontes de erros numéricos e as estimativas de erros utilizadas no trabalho.

- O terceiro capítulo envolve os procedimentos analíticos e numéricos. Descreve a metodologia utilizada para o estudo: os modelos matemáticos das três equações governantes; os modelos numéricos para cada forma de aplicar as condições de contorno com a definição das variáveis de interesse; a solução analítica dos modelos matemáticos e os parâmetros para obter a solução numérica.
- Os capítulos quatro, cinco e seis envolvem os resultados para as equações de Poisson, advecção-difusão e Burgers, respectivamente. Descrevem os erros numéricos das variáveis e as ordens *a posteriori* encontradas.
- O sétimo capítulo envolve a conclusão do trabalho. Descreve as constatações gerais encontradas com o estudo e as contribuições deste trabalho.
- A referência cita o material bibliográfico utilizado para apoiar as definições e as conclusões do trabalho.
- O apêndice A apresenta as deduções das ordens encontradas *a priori* do erro de discretização das variáveis de interesse.
- O apêndice B apresenta as deduções de todos os termos dos coeficientes e fontes encontrados para cada equação governante com a sua respectiva forma de aplicar as condições de contorno.
- O apêndice C apresenta os dados empregados para identificar as simulações computacionais dos modelos numéricos em forma de tabelas.
- O apêndice D apresenta a análise dos coeficientes das três equações governantes para as quatro formas de aplicar as condições de contorno.
- Os apêndices E, F e G apresentam os resultados numéricos obtidos para as equações de Poisson, advecção-difusão e Burgers, respectivamente. Trazem as tabelas com os valores numéricos representados nos gráficos dos capítulos 4, 5 e 6.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo aborda definições e conceitos empregados no decorrer deste trabalho. Define o método numérico empregado para resolver as equações diferenciais que é o método dos volumes finitos. Traz o tipo de condição de contorno utilizada que é a de Dirichlet, bem como as quatro formas de aplicar as condições de contorno: sem volume fictício, com volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero. Define o refinamento uniforme (*RU*) que foi utilizado no trabalho para gerar as malhas computacionais. Aborda as funções de interpolação, definindo a função de interpolação CDS-2 (*Central Differencing Scheme*) de 2ª ordem para os termos difusivos e advectivos e, correção adiada, para os termos não-lineares. Utiliza funções de integração como a regra do retângulo e a regra do trapézio para obter a média da variável de interesse. Emprega as funções DDS (*Downstream Differencing Scheme*) e DDS-2 de 1ª e 2ª ordem para a derivada de 1ª ordem da variável de interesse (ϕ) em $x = 0$, isto é, para o fluxo desta variável na entrada do domínio de cálculo. Conceitua o *solver* utilizado para resolver o sistema de equações algébricas, que é o método direto de solução conhecido como TDMA (*Thomas Algorithm ou Tridiagonal Matrix Algorithm*). Aborda, principalmente, a parte de verificação numérica, que compõe o escopo deste trabalho, definindo o seguinte tema: fontes de erros numéricos, que são os erros de truncamento, iteração, arredondamento e programação, assim como a definição de erro de discretização. Traz as estimativas de erros *a priori*, onde pode ser feita a análise da ordem do erro antes de obter a solução numérica e as estimativas de erros *a posteriori*, que calculam a magnitude do erro numérico. O último tópico desta seção são as ordens efetiva e aparente, que são calculadas a partir da análise *a posteriori*, necessitando das soluções analítica e numérica (respectivamente) para seus cálculos, com breve abordagem sobre o estimador de Richardson.

2.1 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

O método dos volumes finitos (PATANKAR, 1980; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007) é um método numérico que surgiu tendo em vista o método das diferenças finitas (TANNEHILL *et al.*, 1997; FERZIGER e PERIC, 2002). O objetivo deste método é resolver equações diferenciais substituindo os termos existentes nas equações por

expressões algébricas envolvendo a variável de interesse (ϕ). A discretização do domínio é realizada em volumes de controle, garantindo que em cada volume discretizado, a propriedade em questão obedeça às leis de conservação.

Fisicamente, o desenvolvimento do método dos volumes finitos (MVF) caracteriza-se pela obtenção de equações aproximadas por meio da resolução de balanços de massa, energia e quantidade de movimento em um determinado volume de controle sobre um meio contínuo. A interpretação física direta das equações resultantes da aplicação do método e a possibilidade de aplicá-lo sobre malhas com espaçamentos não-uniformes, são as duas principais razões que explicam a aderência ao emprego do método.

Matematicamente, o princípio do método dos volumes finitos necessita de um modelo matemático geral, exemplificado pela equação em regime permanente, denotado por:

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \phi) = \vec{\nabla} \cdot (\Gamma \vec{\nabla} \phi) + S_\phi \quad (2.1)$$

onde o membro à esquerda da igualdade refere-se à advecção da propriedade ϕ ; o primeiro termo do membro à direita da igualdade refere-se à difusão da propriedade ϕ e o segundo termo é o termo fonte. Os escalares ρ e Γ referem-se à massa específica [kg/m³] e a um coeficiente de transporte, respectivamente. O vetor velocidade [m/s] é referenciado por \vec{V} e o operador $\vec{\nabla}$ indica: o gradiente da propriedade ϕ quando assume a operação $\vec{\nabla} \phi$ e o divergente do vetor velocidade \vec{V} quando assume o produto escalar $\vec{\nabla} \cdot \vec{V}$.

Para obtenção da solução numérica por meio do MVF, executam-se as seguintes etapas: definição do problema físico; discretização geométrica do domínio de cálculo; discretização matemática das equações governantes e, finalmente, a obtenção da solução numérica da propriedade de interesse.

A definição do problema, que se constitui na primeira etapa, é obtida com a escolha do modelo matemático e suas condições de contorno e iniciais, da forma de aplicar as condições de contorno, das propriedades dos materiais e da geometria do domínio de cálculo.

A discretização geométrica, na segunda etapa, é obtida pela geração de uma malha sobre o domínio de cálculo, que consiste em um conjunto (N) de volumes de controle com os quais a solução numérica é calculada. A Fig. 2.1 mostra a discretização geométrica com

volumes uniformes, onde o comprimento do domínio de cálculo discretizado (Δx) entre as faces (w) e (e), e os volumes de controle (W), (P) e (E) tem o mesmo tamanho.

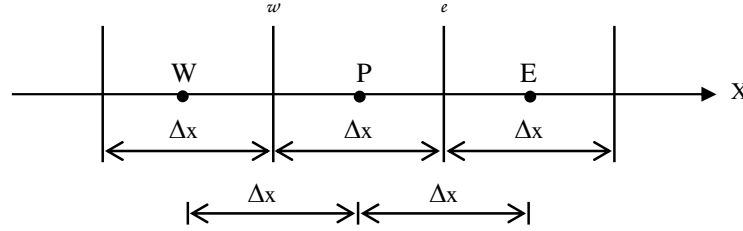


Figura 2.1: Malha 1D com volumes uniformes

A discretização matemática, que é a terceira etapa para resolução do método numérico (MVF), consiste na integração das equações diferenciais que compõem o modelo matemático da Eq. (2.1) sobre cada volume de controle (VC). O resultado é a Eq. (2.2), que tem os mesmos termos da Eq. (2.1), porém integrando cada termo dentro do volume de controle.

$$\int_{VC} \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{V} \phi) dV = \int_{VC} \vec{\nabla} \cdot (\Gamma \vec{\nabla} \phi) dV + \int_{VC} S_\phi dV \quad (2.2)$$

A aplicação do teorema da divergência de Gauss (KREYSZIG, 1999; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007) à Eq. (2.2), ainda na terceira etapa, resulta em integrais de superfície envolvendo as variáveis de interesse como mostra a Eq. (2.3), onde dA representa o elemento de área da superfície do elemento de volume dV e \hat{n} representa um vetor unitário normal à superfície do elemento dA .

$$\int_A (\rho \vec{V} \phi) \cdot \hat{n} dA = \int_A (\Gamma \vec{\nabla} \phi) \cdot \hat{n} dA + \int_{VC} S_\phi dV \quad (2.3)$$

Após a integração são usadas funções de interpolação (PATANKAR, 1980) para descrever os balanços das propriedades da variável ϕ nas faces em função das propriedades armazenadas nos centros dos volumes (SCHNEIDER, 2007). Para cada propriedade ϕ armazenada e para cada um dos (N) volumes, tem-se uma equação algébrica indicada por:

$$a_p \phi_p = a_w \phi_w + a_e \phi_e + b_p \quad (2.4)$$

onde o primeiro membro refere-se ao coeficiente da propriedade (ϕ) no volume de controle principal; os dois primeiros termos do segundo membro referem-se aos coeficientes vizinhos da propriedade (ϕ) nos volumes anterior (oeste) e posterior (leste) ao volume principal, e o último termo refere-se ao coeficiente do termo fonte.

A quarta etapa é a obtenção da solução numérica por meio da resolução do sistema de equações algébricas representado pela Eq. (2.4), em que $P = 1, \dots, N$, onde N representa o número de volumes de controle. Essa resolução pode ser obtida de modo direto ou iterativo (MALISKA, 1995), dependendo do *solver* (FERZIGER e PERIC, 2002) e do tipo de problema (linear ou não-linear) escolhido.

2.2 TIPO DE CONDIÇÃO DE CONTORNO

A Eq. (2.4) representa uma equação aproximada para um volume de controle genérico (P). Porém com o emprego de esquemas de aproximações numéricas obtém-se a solução da propriedade (ϕ) somente nos volumes internos do domínio. Quando o tratamento da propriedade (ϕ) é no primeiro ou no último volume de controle, independente da forma de aplicação, surge a necessidade de incorporar as condições de contorno para resolução do problema.

Os três tipos de condições de contorno utilizados na literatura, inclusive em transferência de calor e de massa, para resolver equações diferenciais parciais, são as condições de contorno: de Dirichlet, quando a propriedade (ϕ) é conhecida no contorno; de Neumann, quando o fluxo da propriedade (ϕ) é conhecido no contorno; e de Robin, quando a condição de contorno é mista (PATANKAR, 1980; WEISSTEIN, 2009).

O tipo de condição de contorno de Dirichlet foi utilizado neste trabalho, devido à facilidade em discretização e implementação, já que os valores da propriedade (ϕ) nos contornos eram conhecidos, fazendo com que o modelo numérico tivesse uma solução analítica disponível para posterior análise com a solução numérica.

Fisicamente, uma condição de contorno unidimensional é especificada em $x = 0$ e em $x = L$. A condição de contorno de Dirichlet corresponde a uma situação na qual os extremos do domínio se encontram à uma propriedade (ϕ) fixa ou constante (ϕ_c). A condição de contorno de Dirichlet pode ser denominada condição de contorno de primeira espécie. Na

prática, a situação descrita por essa condição ocorre de forma aproximada quando, por exemplo, o extremo do domínio está em contato imediato com um sólido em fusão ou com um líquido em ebulição. Nos dois casos há transferência de calor entre os meios físicos, que permanecem à temperatura do processo de mudança de fase.

Matematicamente, um número satisfatório de condições de contorno para cada equação diferencial governante é necessário. Esse número depende da ordem da equação diferencial no espaço. A condição de contorno de Dirichlet para um regime permanente, é representada por:

$$\phi(x=0)=\phi_c \text{ e } \phi(x=L)=\phi_c \quad (2.5)$$

onde a propriedade (ϕ) em $x=0$ e em $x=L$ assume um valor constante.

2.3 FORMAS DE APLICAR CONDIÇÕES DE CONTORNO

Não basta apenas utilizar um tipo de condição de contorno nas aproximações numéricas para deduzir os coeficientes e os termos fontes, é necessário escolher a forma com a qual a condição de contorno será incorporada ao realizar a discretização geométrica, ou seja, ao gerar a malha numérica. Abaixo estão descritas quatro formas de aplicar ou incorporar o tipo de condição de contorno que são freqüentemente empregadas em problemas de dinâmica de fluidos computacional, e que fazem parte do objeto de estudo deste trabalho. São elas: sem volume fictício; com volume fictício; com meio-volume; com volume de espessura zero.

2.3.1 Condições de Contorno Aplicadas Sem Volume Fictício

A aplicação das condições de contorno sem volume fictício é realizada por meio da integração das equações de conservação para todos os volumes de controle do domínio, incorporando os volumes dos contornos, que tem uma face adjacente a um volume interno e a outra face sobre o contorno (PATANKAR, 1980; MALISKA, 1995).

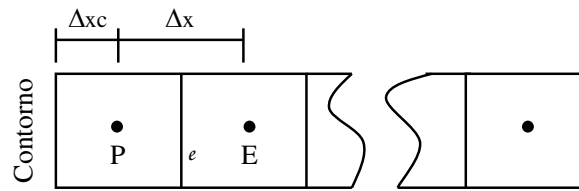


Figura 2.2: Condições de contorno com volumes inteiros (Maliska, 1995)

Neste caso, a discretização do domínio é realizada em volumes inteiros. Segundo Maliska (1995) é o procedimento mais adequado para aplicação das condições de contorno, devido ao seu embasamento físico e à possibilidade de generalização para sistemas coordenados mais complexos.

No trabalho foi utilizado o sistema cartesiano de coordenadas em problemas unidimensionais com malhas uniformes. A Fig. 2.2 representa a discretização do domínio feita com volumes elementares para aplicação desta forma de condição de contorno (sem volume fictício ou volumes incorporados aos contornos), onde P e E são os centros dos volumes e Δx é a distância entre os volumes de controle, sendo Δx_c a distância do contorno ao centro do volume imediatamente vizinho.

2.3.2 Condições de Contorno Aplicadas Com Volume Fictício

É uma prática atraente e de fácil aplicação (MALISKA, 1995), assumindo que todos os volumes de controle sejam inteiros e internos, inclusive os volumes dos contornos. Com a criação de volumes fictícios, os volumes dos contornos são interpretados como volumes internos e os volumes fictícios passam a ser os volumes adjacentes aos contornos. Neste caso, existe uma desvantagem em relação à aplicação das condições de contorno sem volume fictício, pois aqui são criadas novas incógnitas, aumentando o tamanho do sistema linear.

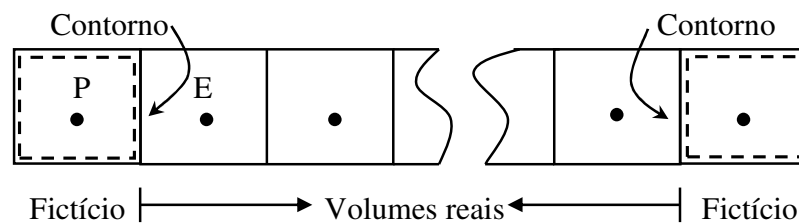


Figura 2.3: Condições de contorno com volumes fictícios (Maliska, 1995)

A Fig. 2.3 mostra o volume de controle P representando um volume fictício (o volume do contorno) e o volume de controle E representando um volume real (os volumes internos).

Para cada volume fictício devem-se criar equações em função das condições de contorno existentes. A aplicação da condição de contorno para a propriedade prescrita é uma extrapolação linear do valor do contorno com o primeiro volume real:

$$\phi_c = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (2.6)$$

onde ϕ_c é a condição de contorno real. Em seguida, isola-se a variável no volume principal:

$$\phi_P = -\phi_E + 2\phi_c \quad (2.7)$$

Conseqüentemente, em comparação com a Eq. (2.4), as expressões para os coeficientes e termo fonte assumem os valores:

$$a_w = 0; \quad a_p = 1; \quad a_e = -1; \quad b_p = 2\phi_c \quad (2.8)$$

onde o termo fonte (b_p) recebe o valor da propriedade de interesse prescrita (ϕ_c), fornecida pela condição de contorno de Dirichlet.

2.3.3 Condições de Contorno Aplicadas Com Meio-Volume

Para aplicar as condições de contorno com meio-volume é necessário criar uma malha onde o ponto central de um volume de controle fique sobre o contorno (PATANKAR, 1980). A Fig. 2.4 mostra essa discretização, onde a malha é unidimensional com meio-volume de controle junto ao contorno e volumes internos inteiros.

Segundo Maliska (1995), este procedimento ocasiona dois problemas que antes não existiam quando eram empregados os dois métodos de aplicação expostos anteriormente (sem volume fictício ou volumes incorporados aos contornos e com volume fictício).

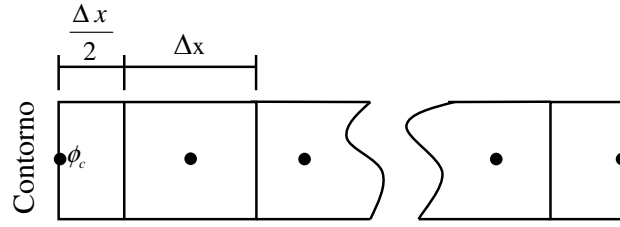


Figura 2.4: Condições de contorno com meio-volume (Maliska, 1995)

O primeiro problema verificado com a utilização de meio-volumes é a não-uniformidade dos volumes, a qual vai se agravando quando o problema exige mais dimensões para serem calculadas. O segundo problema aparece quando a propriedade do contorno é conhecida. Aparentemente se a propriedade é conhecida não é necessário criar uma equação para o contorno; por outro lado, a aplicação do meio-volume não respeita o princípio de conservação das propriedades no meio-volume, pois

$$\phi_p = \phi_c \quad (2.9)$$

mostrando-se que para utilizar a condição de contorno de uma propriedade prescrita em meio-volume, a aplicação é direta.

Galarça (2005) menciona a não-uniformidade dos volumes no contorno. Porém utiliza um procedimento de correção para obter os valores da propriedade nos contornos, com as condições de contorno de Neumann e Robin, depois que a convergência foi atingida, reparando o problema do princípio de conservação das propriedades quando o domínio é bidimensional.

2.3.4 Condições de Contorno Aplicadas Com Volume de Espessura Zero

Para aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero é necessário criar uma malha onde o ponto central de um volume de controle com dimensão nula fique sobre o contorno. Patankar (1980) utiliza essa forma de aplicação em seu estudo e Rocha (2000) emprega as condições de contorno com volume de espessura zero como uma nova metodologia no tratamento da interface entre as regiões sólida e líquida. Segundo Rocha (2000), a utilização do volume de controle com espessura zero na interface permite adicionar ou retirar massa sem a necessidade de termos fontes adicionais.

A Fig. 2.5 ilustra geometricamente a discretização do domínio de cálculo com a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero:

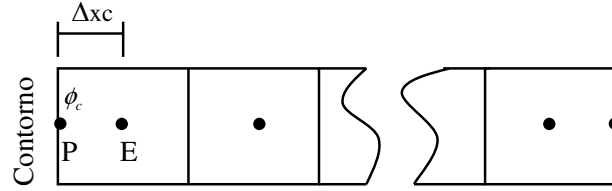


Figura 2.5: Condições de contorno com volume de espessura zero

onde Δxc é a distância do volume de espessura zero ao volume imediatamente vizinho; P é o volume de espessura zero e ϕ_c é a condição de contorno prescrita que, neste caso, coincide com o volume de espessura zero.

Com relação à Fig. 2.5, o procedimento para obtenção da equação aproximada no volume P , que representa o volume de espessura zero, é forçar o valor da propriedade no contorno e integrar a equação diferencial nos outros volumes. Em decorrência, a equação que representa a variável de interesse no contorno (ϕ_p) é a Eq. (2.9), onde o valor da variável ϕ_c no contorno é conhecido e o valor do volume de espessura zero (ϕ_p) recebe o valor de ϕ_c .

2.4 REFINO DA MALHA COMPUTACIONAL

O refino da malha pode ser realizado de diversas maneiras dentro do método dos volumes finitos. Schneider (2007) estudou cinco tipos de refinamentos diferentes: refino uniforme (RU), refino semi-uniforme (RSU), refino entre centros (RC), refino entre centros com F_e constante (RCF) e refino aleatório (RA). Foi verificada nos estudos de Schneider (2007) a influência do tipo de refino da malha sobre a versatilidade da malha (uniforme e não-uniforme).

Neste trabalho a malha computacional utilizada para estudo foi a malha estruturada. Os volumes de controle foram considerados de nós centrados entre as faces e faces centradas entre os nós, onde a distância (Δx) entre os centros dos volumes e entre as faces adjacentes a estes volumes é igual. O refino utilizado para gerar as malhas foi o refino uniforme (RU).

O refino uniforme consiste em dividir cada volume de controle em q volumes de igual tamanho, independentemente da posição em que se encontra o centro do volume. O

refino uniforme pode ser utilizado tanto em malhas uniformes como em malhas não-uniformes. A Fig. 2.6 mostra um exemplo da aplicação do refino uniforme:

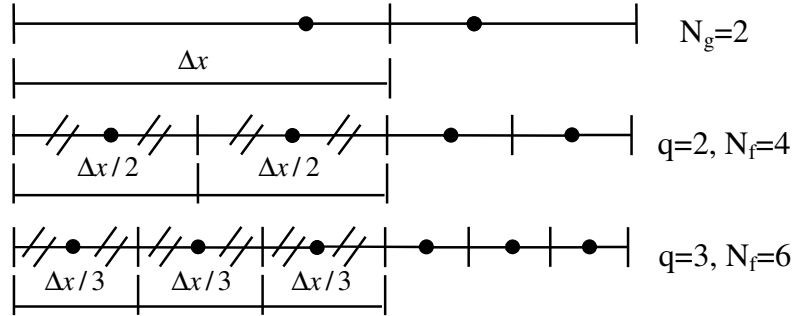


Figura 2.6: Refino uniforme em malha de face centrada entre volumes (Schneider, 2007)

onde q representa a razão de refino entre as malhas consecutivas, sendo $q = 2$ para razão de refino 2 com relação à malha grossa e $q = 3$ para razão de refino 3 com relação à malha grossa; N_g representa o número de volumes na malha grossa e N_f representa o número de volumes na malha fina.

2.5 FUNÇÕES DE INTERPOLAÇÃO

Os métodos numéricos utilizam funções de interpolação para aproximar numericamente os termos das equações diferenciais (MALISKA, 1995; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007). Para o método dos volumes finitos, após a integração da Eq. (2.3) é feita a aplicação das funções de interpolação, conectando o volume principal (P) aos seus vizinhos, conforme ilustra a Fig. 2.1, produzindo um sistema de equações algébricas representado pela Eq. (2.4).

A Fig. 2.1 evidencia uma malha unidimensional com volumes de controle uniformes, ou seja, a distância entre os nós (W), (P) e (E) são iguais e a distância entre as faces (w) e (e) também são iguais, caracterizando a uniformidade da malha numérica.

A escolha de uma função de interpolação para aproximar numericamente os termos da equação diferencial é fundamental, pois quanto mais pontos forem envolvidos, maior será a complexidade da aproximação numérica e menor será o erro de truncamento dessa aproximação (MARCHI, 2001; SCHNEIDER, 2007).

Existem várias funções de interpolação descritas e utilizadas em CFD. Neste trabalho foram utilizadas as funções de interpolação CDS-2 (*Central Differencing Scheme*) (FERZIGER e PERIC, 2002) de 2ª ordem tanto para os termos difusivos quanto para os termos advectivos e correção adiada para os termos não-lineares (TANNEHILL *et al.*, 1997). As funções DDS (*Downstream Differencing Scheme*) e DDS-2 de 1ª e 2ª ordem para a derivada da propriedade (ϕ) em $x = 0$ e as funções de integração pela regra do retângulo e pela regra do trapézio para a média da variável de interesse.

2.5.1 Funções de Interpolação para Termos Difusivos

O esquema CDS-2 utiliza uma interpolação linear, conduzindo a erros de 2ª ordem. Considerando a disposição da malha na Fig. 2.1, as aproximações das derivadas da propriedade (ϕ) para as faces (w) e (e) do volume de controle (P), são:

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x_e} \quad (2.10)$$

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_w = \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta x_w} \quad (2.11)$$

onde a propriedade (ϕ) é avaliada no centro dos volumes de controle e as distâncias (Δx) são calculadas entre as faces.

Os esquemas DDS e DDS-2 empregam funções de interpolação linear, conduzindo a erros de 1ª e 2ª ordens, respectivamente. As aproximações para a derivada da variável de interesse (ϕ) em $x = 0$ para a face (e) do volume de controle (P), são respectivamente:

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = \frac{2(\phi_P - \phi_c)}{\Delta x_e} \quad (2.12)$$

$$\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = \frac{9\phi_P - \phi_E - 8\phi_c}{3\Delta x_e} \quad (2.13)$$

onde (ϕ_c) é a condição de contorno conhecida.

2.5.2 Funções de Interpolação para Termos Advectivos

O esquema CDS-2, descrito acima para os termos difusivos, utiliza uma interpolação linear para os termos advectivos. Considerando a disposição da malha na Fig. 2.1, as aproximações, para a propriedade (ϕ) nas faces (w) e (e) do volume de controle (P) são:

$$\phi_e = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad (2.14)$$

$$\phi_w = \frac{\phi_W + \phi_P}{2} \quad (2.15)$$

onde as igualdades das Eqs. (2.14) e (2.15) obedecem à disposição para malhas uniformes.

2.5.3 Correção Adiada para Termos Não-lineares

Para resolver a variável de interesse (ϕ) , os termos com ϕ^2 devem ser linearizados, isto é, uma parte é mantida como incógnita no sistema de equações e outra parte é considerada conhecida, ficando nos coeficientes do sistema (FERZIGER e PERIC, 2002). A Eq. (2.16) ilustra esse desmembramento onde a variável ϕ^* representa a parcela conhecida do sistema de equações e a variável ϕ representa a incógnita do sistema, que deve ser calculada.

$$\phi^2 = \phi^* \phi \quad (2.16)$$

A função de interpolação utilizada para aproximar numericamente a variável (ϕ) na Eq. (2.16) é a função UDS (*Upstream Differencing Scheme*) de 1ª ordem. Considerando a velocidade para a propriedade (ϕ) sendo analisada no sentido positivo $(u > 0)$, a aproximação numérica é:

$$\phi_e = \phi_P \quad (2.17)$$

$$\phi_w = \phi_W \quad (2.18)$$

onde a variável de interesse (ϕ) é avaliada nas faces dos volumes de controle. Para a parte explícita do sistema (ϕ^*), as aproximações numéricas para as faces leste (e) e oeste (w) são as Eqs. (2.14) e (2.15), que são de 2ª ordem.

Para que a equação diferencial não degenere o erro, devido às aproximações serem de 1ª e de 2ª ordem, emprega-se a correção adiada, cuja finalidade é atualizar a variável de interesse principal utilizando os valores da iteração anterior. A equação que representa a correção adiada é:

$$\phi_{face} = \phi_{face,UDS} + \beta(\phi_{face,CDS-2}^* - \phi_{face,UDS}^*) \quad (2.19)$$

onde *face* representa a face escolhida; * representa os valores explícitos da iteração anterior; $\phi_{face,UDS}$ representa a parte implícita e o parâmetro β efetiva o emprego da correção adiada. Por exemplo, se β assumir valores entre 0 e 1 ($0 < \beta < 1$) a ordem do erro da solução numérica será mista, pois as duas funções de interpolação utilizadas (UDS e CDS-2) influenciam na obtenção da solução. Se $\beta = 0$ o erro da solução numérica será de 1ª ordem, pois zera o segundo termo do segundo membro e a função de interpolação UDS domina a solução. Se $\beta = 1$ o erro da solução numérica será de 2ª ordem, pois zera os termos que contêm a função de interpolação UDS, dominando assim, a função CDS-2 (após a convergência, quando $\phi = \phi^*$).

2.6 FUNÇÕES DE INTEGRAÇÃO

A idéia básica de integração numérica consiste na aproximação da função integrando por um polinômio. A escolha desse polinômio e dos pontos que são usados na sua determinação definem os diversos métodos de integração (CUNHA, 2000). As fórmulas de integração representam somatórios cujas parcelas são valores da função $\phi(x)$ calculados em pontos e multiplicados por pesos convenientemente escolhidos. Assim, a fórmula de integração numérica é:

$$\int_0^L \phi(x) dx \cong \sum_{i=0}^N w_i \phi(x_i) \quad (2.20)$$

onde $0 \leq x_0 < x_1 < \dots < x_N \leq L$ representam os pontos de integração e w_i representa os pesos da fórmula de integração. As funções de integração empregadas neste trabalho, para calcular a média da variável de interesse (ϕ), foram as integrações pelas regras do retângulo e do trapézio.

2.6.1 Integração pela Regra do Retângulo

A fórmula de integração pela regra do retângulo é obtida subdividindo o intervalo de integração ($0 \leq x \leq L$) em (N) subintervalos de qualquer comprimento (KREYSZIG, 1999).

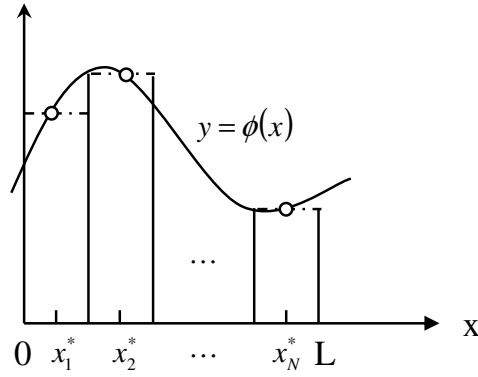


Figura 2.7: Regra do retângulo

A Fig. 2.7 mostra cada subintervalo aproximado de (ϕ) pela variável $\phi(x_i^*)$. Neste caso, a variável (ϕ) é aproximada pela função degrau, os (N) retângulos têm suas áreas dadas por:

$$\phi(x_1^*)\Delta x, \dots, \phi(x_N^*)\Delta x \quad (2.21)$$

e a integral pela regra do retângulo é:

$$\bar{\phi} = \int_0^L \phi(x) \approx \Delta x [\phi(x_1^*) + \phi(x_2^*) + \dots + \phi(x_N^*)] \quad (2.22)$$

onde $\Delta x = (L - 0) / N$.

2.6.2 Integração pela Regra do Trapézio

A fórmula de integração pela regra do trapézio geralmente é mais acurada que a regra do retângulo (KREYSZIG, 1999). A Fig. 2.8 mostra que a regra do trapézio é obtida tomando a mesma subdivisão da regra do retângulo e aproximando ϕ por segmentos de linha com pontos finais nos seus extremos.

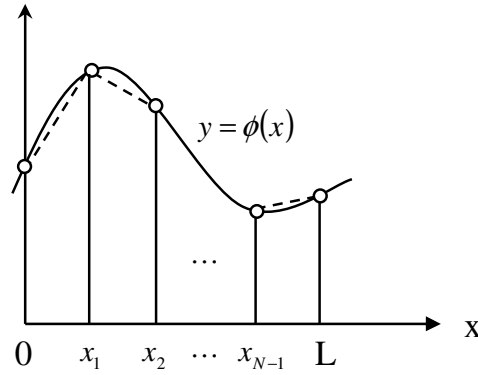


Figura 2.8: Regra do trapézio

A área sob a curva de (ϕ) entre $[0, L]$ é aproximada por (N) trapezóides de área:

$$\frac{1}{2}[\phi(0) + \phi(x_1)]\Delta x, \quad \frac{1}{2}[\phi(x_1) + \phi(x_2)]\Delta x, \quad \dots, \quad \frac{1}{2}[\phi(x_{N-1}) + \phi(L)]\Delta x \quad (2.23)$$

Tomando sua soma, obtém-se a regra do trapézio:

$$\bar{\phi} = \int_0^L \phi(x) dx \approx \Delta x \left[\frac{1}{2}\phi(0) + \phi(x_1) + \phi(x_2) + \dots + \phi(x_{N-1}) + \frac{1}{2}\phi(L) \right] \quad (2.24)$$

onde Δx assume o mesmo valor empregado na regra do retângulo.

2.7 MÉTODO DIRETO DE SOLUÇÃO

Para resolver o sistema de equações algébricas representado pela Eq. (2.4), ou seja, para obter os valores das soluções numéricas para a variável de interesse (ϕ) , utilizou-se o

solver TDMA (*Thomas Algorithm ou Tridiagonal Matrix Algorithm*) encontrado em Ferziger e Peric (2002) e em Versteeg e Malalasekera (2007).

O *solver* TDMA é um método direto de solução de equações, utilizado tanto para obter valores de equações unidimensionais quanto bidimensionais. No caso unidimensional, o *solver* TDMA faz a varredura das informações em linha e no caso bidimensional, um método iterativo conhecido por ADI (*Alternating Direction Implicit*) (MALISKA, 1995; FERZIGER e PERIC, 2002) combinado com o método TDMA é utilizado. O processo torna-se iterativo, fazendo a varredura em duas direções, linha por linha e/ou coluna por coluna.

O método direto deve ter prioridade sobre o método iterativo em duas situações: quando é necessária a solução exata do sistema de equações sem erros de iteração, e principalmente, quando o tempo de computação é menor ou igual ao executado quando usado o método iterativo.

Neste trabalho o domínio de cálculo é unidimensional e assim a matriz de coeficientes utilizada gera um sistema de equações tridiagonal. A obtenção da solução numérica é exata, sem erros de iteração provocados pela utilização do *solver*, pois o processo de resolução é direto, sem iterações internas.

2.8 VERIFICAÇÃO EM CFD

Segundo Suero (2006), a origem dos erros está ligada aos processos de análise e solução de um problema. Por meio dos erros oriundos do processo de solução dos problemas de engenharia, desenvolveu-se uma teoria para verificar quais as fontes que são provenientes de erros e estimar, com acurácia, os valores e as ordens dos erros envolvidos (AIAA, 1998).

O erro de modelagem, que está presente tanto no método analítico quanto no método numérico, é a diferença entre o valor verdadeiro de uma variável de interesse e sua solução analítica (FERZIGER e PERIC, 2002). De acordo com Marchi (2007), este erro é causado pelas simplificações feitas sobre o fenômeno real na concepção dos modelos matemáticos.

Se o valor verdadeiro da variável é desconhecido, estima-se o valor do erro de modelagem, por meio de comparações entre as soluções analíticas e numéricas com resultados experimentais. O processo que quantifica a estimativa do erro de modelagem é chamado de validação (AIAA, 1998).

O erro numérico, decorrente da aplicação do método numérico, é definido como a diferença entre a solução analítica exata (Φ) e a solução numérica (ϕ) de uma determinada equação (FERZIGER e PERIC, 2002). Pela Eq. (2.25) a solução numérica ideal deve ser igual à solução analítica exata do problema, situação em que o erro numérico é nulo (MARCHI, 2001).

$$E(\phi) = \Phi - \phi \quad (2.25)$$

O processo que quantifica o erro numérico é denominado de verificação (ROACHE, 1998; FORTUNA, 2000). O objetivo da verificação é determinar de que maneira um modelo matemático pode ser resolvido adequadamente por meio de um método numérico.

A magnitude aceitável do erro numérico depende de três fatores: finalidade, tempo e recursos (SCHNEIDER, 2007). Conforme o fator de influência para obter a solução numérica, pode-se tolerar um erro numérico maior ou menor. Por exemplo, no pré-projeto da construção de uma turbina, o erro numérico pode ser tolerado, mesmo sendo um erro influenciável; porém no projeto definitivo, o erro numérico deve ser o mínimo possível. Para simular fatos ou acontecimentos que demandem resposta imediata, por exemplo, um ciclone ou uma tempestade, o tempo é muito importante para obtenção da solução numérica em si, isto quer dizer que o erro pode ter uma tolerância maior. E os recursos dependem de quanta tecnologia e investimento tem-se para solucionar o problema, assim modificando a magnitude aceitável do erro numérico.

2.8.1 Fontes de Erros Numéricos

De acordo com Marchi e Silva (2002), as quatro fontes de erros envolvidas no erro numérico são: erro de truncamento (ε_τ); erro de iteração (ε_n); erro de arredondamento (ε_π) e erro de programação (ε_p). Matematicamente, tem-se:

$$E(\phi) = E(\varepsilon_\tau, \varepsilon_n, \varepsilon_\pi, \varepsilon_p) \quad (2.26)$$

onde qualquer uma das quatro fontes de erros podem ter magnitudes e sinais diferentes, havendo cancelamentos parciais ou totais entre as fontes envolvidas.

Erro de Truncamento

A primeira fonte de erro numérico é o erro de truncamento, que tem origem nas aproximações numéricas empregadas na discretização do modelo matemático. Conforme Marchi (2001), o erro de truncamento reduz com a diminuição do tamanho (Δx) dos volumes de controle da malha. Também pode-se dizer que o erro de truncamento (ε_τ) de uma equação diferencial é o resíduo que resulta quando se substitui a solução analítica exata da variável dependente (Φ) na equação discretizada do modelo matemático.

Conhecendo-se a solução analítica exata da variável dependente (Φ), o valor do erro de truncamento pode ser obtido substituindo a variável dependente (Φ) em termos da série de Taylor (KREYSZIG, 1999) para os volumes que estão envolvidos na equação discretizada exceto para o próprio volume (P). Com isso, a equação geral do erro de truncamento unidimensional de uma equação diferencial ou de uma aproximação numérica qualquer admitindo um espaçamento uniforme (Δx) entre os volumes, pode ser representada por (MARCHI, 2001):

$$\varepsilon_\tau(\phi) = c_1 \Delta x^{pL} + c_2 \Delta x^{p2} + c_3 \Delta x^{p3} + c_4 \Delta x^{p4} + \dots \quad (2.27)$$

onde os coeficientes (c_i) podem assumir valores positivos ou negativos, ou ser função da variável dependente (Φ) ou de suas derivadas, isto é, podem variar com a coordenada x , mas independem do tamanho (Δx) dos volumes da malha.

Por definição as ordens verdadeiras (pV) na Eq. (2.27) são os expoentes do espaçamento (Δx) nos termos não-nulos, dadas por pL , $p2$, $p3$, $p4$, ..., e seguem a relação dada por $(pL) < (p2) < (p3) < (p4) < \dots$. Geralmente são números inteiros positivos e constituem uma progressão aritmética, isto é, a diferença entre uma ordem e a subsequente é constante. O número de ordens verdadeiras da equação é infinito, portanto o erro de truncamento (ε_τ) é constituído por uma quantidade infinita de termos não-nulos.

O menor expoente de Δx na Eq. (2.27), ou seja, na equação geral do erro de truncamento, é chamado de ordem assintótica (pL). É um número inteiro positivo e satisfaz a condição $pL \geq 1$. Quando o tamanho (Δx) dos elementos da malha tende a zero, ou seja, quando $\Delta x \rightarrow 0$, o primeiro termo do erro de truncamento é o principal componente, isto é, o

primeiro termo domina o valor total de ε_τ . Conhecer a ordem do erro numérico permite a avaliação da redução do erro em função do tamanho (Δx) dos elementos da malha.

Erro de Iteração

O erro de iteração, segundo Ferziger e Peric (2002), é definido como a diferença entre a solução exata das equações discretizadas e a solução numérica em uma determinada iteração. A Eq. (2.28) mostra matematicamente a definição de erro de iteração, onde k representa o número da iteração corrente no processo de solução do sistema de equações algébricas, gerado pelas equações discretizadas do modelo matemático e $k \rightarrow \infty$ representa a solução exata das equações discretizadas.

$$\varepsilon_n(\phi_i) = \phi_{i,k \rightarrow \infty} - \phi_{i,k} \quad (2.28)$$

O erro de iteração é causado: pelo emprego de métodos iterativos para resolução do sistema de equações (MALISKA, 1995); pelo uso de métodos segregados para obter a solução de modelos matemáticos com mais de uma equação diferencial (FERZIGER e PERIC, 2002); por equações representativas com características não-lineares, que modelam os problemas em CFD; e a utilização de métodos *multigrid* incorporados aos modelos numéricos (PINTO *et al.*, 2005). O erro de iteração reduz com o aumento do número de iterações.

Erro de Arredondamento

O erro de arredondamento ocorre devido à representação finita dos números reais nas computações, isto é, são considerados erros de truncamento porém, oriundos da necessidade em limitar o número de dígitos usados para armazenar o conteúdo das variáveis. Está diretamente ligado ao número de *bytes* usados para representar as variáveis nos computadores e ao número de termos empregados no cálculo das séries infinitas de funções pré-definidas da linguagem de programação.

Em geral, o erro de arredondamento aumenta com a redução do tamanho do volume de controle (Δx), pois requer mais cálculos computacionais para realizar as operações aritméticas, e conseqüentemente, necessita de mais casas decimais para representar seu valor.

Erro de Programação

O erro de programação inclui os erros advindos da escolha incorreta de um modelo numérico para aproximação de um modelo matemático (MARCHI, 2001); da implementação equivocada do modelo numérico para o código computacional; e do uso incorreto do programa computacional durante a obtenção da solução numérica.

Erro de Discretização

Quando o erro da solução numérica provém apenas do erro de truncamento, ele é denominado de erro de discretização. O erro de discretização, segundo Ferziger e Peric (2002), é a diferença entre a solução exata das equações governantes e a solução exata da aproximação discreta. A Eq. (2.29) representa o erro de discretização (MARCHI, 2001; FERZIGER e PERIC, 2002), onde os coeficientes que independem de Δx são representados por C_i ; as ordens verdadeiras do erro de discretização são pL , $p2$, $p3$, $p4$, ..., onde pL representa a ordem assintótica do erro de discretização.

$$E(\phi) = C_1 \Delta x^{pL} + C_2 \Delta x^{p2} + C_3 \Delta x^{p3} + C_4 \Delta x^{p4} + \dots \quad (2.29)$$

Conforme Schneider (2007), para que o erro numérico seja composto somente pelo erro de discretização, é necessário observar que:

- 1) os modelos matemáticos abordados devem ser simplificados para evitar erros de programação;
- 2) a precisão computacional adotada para armazenamento das variáveis seja adequada para minimizar erros de arredondamento;
- 3) para os problemas que necessitem de um processo iterativo, o número de iterações deve ser suficiente para atingir o erro de máquina.

O erro de discretização é estimado de duas formas (OBERKAMPF e TRUCANO, 2002): *a priori* e *a posteriori*. As estimativas de erro *a priori* estimam a ordem assintótica (pL) do erro de discretização e as estimativas de erro *a posteriori* estimam a magnitude do erro de discretização, por meio de estimadores.

2.8.2 Estimativas de Erros *a Priori*

As estimativas de erro *a priori* são usadas para estimar a ordem assintótica (pL) do erro de discretização, proporcionando uma análise qualitativa do erro de discretização antes da obtenção da solução numérica (SUERO, 2006).

O procedimento adotado para estimar o erro de discretização *a priori* é estimar o erro de truncamento (ε_τ) do modelo matemático por meio da série de Taylor (TANNEHILL *et al.*, 1997) e, admitir que o erro de discretização tenha a mesma forma funcional da Eq. (2.29) quando o tamanho (Δx) dos volumes de controle tende a zero:

$$E(\phi) = C_1 \Delta x^{pL} \quad (\text{para } \Delta x \rightarrow 0) \quad (2.30)$$

onde C_1 representa um coeficiente com valor constante, porém desconhecido.

Portanto, somente com a estimativa de erro *a priori* não é possível obter o valor do erro de discretização $E(\phi)$, mas é possível obter o valor da ordem assintótica (pL) e também, avaliar qual o efeito produzido pela redução de Δx sobre o erro (E). Então, conhecendo-se pL e, pelo menos, duas soluções numéricas em malhas diferentes ($\Delta x_f = \text{malha_fina}$) e ($\Delta x_g = \text{malha_grossa}$) tem-se:

$$E(\phi_f) = C_1 \Delta x_f^{pL} \quad (2.31)$$

$$E(\phi_g) = C_1 \Delta x_g^{pL} \quad (2.32)$$

realizando a operação de divisão entre as duas equações, tem-se:

$$\frac{E(\phi_f)}{E(\phi_g)} = \frac{C_1 \Delta x_f^{pL}}{C_1 \Delta x_g^{pL}} = \left(\frac{\Delta x_f}{\Delta x_g} \right)^{pL} \quad (2.33)$$

para o caso do refino da malha ser: $\Delta x_f = (\Delta x_g)/2$ e $pL = 2$, tem-se:

$$\frac{E(\phi_f)}{E(\phi_g)} = \left(\frac{\frac{(\Delta x_g)}{2}}{(\Delta x_g)} \right)^2 = \left(\frac{1}{2} \right)^2 = \frac{1}{4} \quad (2.34)$$

onde a redução do tamanho dos volumes da malha à metade reduziu em $1/4$ o erro numérico. Quanto maior o valor de pL , mais rapidamente o erro diminui com a redução do Δx .

2.8.3 Estimativas de Erros *a Posteriori*

As estimativas de erro *a posteriori* são usadas para estimar efetivamente a magnitude do erro de discretização. Existem alguns métodos que podem ser empregados (SCHNEIDER, 2007). Dependendo da forma de aplicação da técnica de discretização, a estimativa do erro pode ser:

- Baseada na solução numérica obtida em uma única malha, que ocorre quando se emprega o método dos elementos finitos (HUGHES, 2000).
- Baseada nas soluções numéricas obtidas em múltiplas malhas, que ocorre quando se empregam os métodos de diferenças finitas (TANNEHILL *et al.*, 1997) e dos volumes finitos (MALISKA, 1995).

Alguns estimadores de erros de discretização *a posteriori* encontrados na literatura em CFD e que foram estudados por Marchi (2001) são: delta, Richardson, GCI (*Grid Convergence Index*), multicoeficientes, convergente e coerente.

2.8.4 Ordens Efetiva e Aparente

Além dos conceitos de ordens verdadeiras e assintótica, estimadas *a priori*, empregam-se para análise *a posteriori* os conceitos de ordem efetiva do erro de discretização e de ordem aparente da incerteza das soluções numéricas. A ordem efetiva (pE) do erro de discretização é calculada com o emprego das soluções analíticas e numéricas conhecidas. A ordem aparente (pU) da incerteza, porém, é baseada somente nas soluções numéricas da propriedade (ϕ).

Ordem Efetiva

A ordem efetiva (pE) é definida como a inclinação local da curva do erro de discretização (E) da solução numérica da variável (ϕ) *versus* o tamanho (Δx) dos elementos da malha num gráfico logarítmico (MARCHI, 2001). Seu cálculo permite verificar na prática, isto é, *a posteriori*, se à medida que Δx é reduzido, a ordem do erro de discretização das soluções numéricas tende à ordem assintótica do erro de truncamento, obtido *a priori*. Matematicamente, a ordem efetiva (pE) é obtida por:

$$C_E \Delta x^{pE} = E(\phi) \quad (2.35)$$

onde C_E é um coeficiente independente de Δx . A ordem efetiva pode ser obtida de duas formas: com o valor do erro de discretização dado pela Eq. (2.25), empregando duas soluções numéricas, ou com a equação geral do erro de discretização, Eq. (2.29), utilizando apenas uma solução numérica. Neste trabalho optou-se pelo cálculo da ordem efetiva baseado em duas soluções numéricas, por ser o procedimento mais utilizado em verificação.

Aplicando-se a Eq. (2.35) a duas malhas diferentes, com Δx_f (malha fina) e Δx_g (malha grossa), tem-se:

$$C_E \Delta x_f^{pE} = E(\phi_f) \quad (2.36)$$

$$C_E \Delta x_g^{pE} = E(\phi_g) \quad (2.37)$$

onde ϕ_f e ϕ_g representam as soluções numéricas obtidas nas malhas fina e grossa, respectivamente. As Eqs. (2.36) e (2.37) formam um sistema de duas equações com duas incógnitas: C_E e pE . Nestas duas equações, os erros das soluções nas malhas fina e grossa $E(\phi_f)$ e $E(\phi_g)$ e os tamanhos das malhas (Δx_f) e (Δx_g) são conhecidos. Resolvendo o sistema de equações para pE obtém-se:

$$pE = \frac{\log \left[\frac{E(\phi_g)}{E(\phi_f)} \right]}{\log(q)} \quad (2.38)$$

onde a razão de refino da malha (q) é:

$$q = \frac{\Delta x_g}{\Delta x_f} \quad (2.39)$$

Considerando-se a definição do erro de discretização, Eq. (2.25), na Eq. (2.38), tem-se que a ordem efetiva também pode ser calculada por meio de:

$$pE = \frac{\log \left[\frac{(\Phi - \phi_g)}{(\Phi - \phi_f)} \right]}{\log(q)} \quad (2.40)$$

onde Φ representa a solução analítica exata. O valor da ordem efetiva (pE) representa a inclinação média da curva do erro de discretização, *versus* Δx , entre Δx_f e Δx_g , pois seu cálculo por meio das Eqs. (2.38) e (2.40), necessita do valor de duas soluções numéricas.

Ordem Aparente

A ordem aparente (pU) é definida como a inclinação local da curva da incerteza (U) da solução numérica da variável (ϕ) *versus* o tamanho (Δx) dos elementos da malha num gráfico logarítmico (MARCHI, 2001). Seu cálculo permite verificar na prática, isto é, *a posteriori*, se à medida que Δx é reduzido, a ordem da incerteza das soluções numéricas tende à ordem assintótica do erro de truncamento, obtida *a priori*. A ordem aparente (pU) é obtida por:

$$K_U \Delta x^{pU} = U(\phi) \quad (2.41)$$

onde K_U é um coeficiente que é admitido ser independente de Δx . O valor do erro numérico estimado é calculado por:

$$U(\phi) = \phi_\infty - \phi \quad (2.42)$$

onde U representa o cálculo do valor estimado do erro numérico pela diferença entre a estimativa da solução analítica (ϕ_∞) e o valor da solução numérica (ϕ). Assim, com a Eq. (2.42) em (2.41), tem-se:

$$K_U \Delta x^{pU} = \phi_\infty - \phi \quad (2.43)$$

Escrevendo a Eq. (2.43) para três soluções numéricas $(\phi_f, \phi_g \text{ e } \phi_{sg})$, obtidas em três malhas diferentes $(\Delta x_f, \Delta x_g \text{ e } \Delta x_{sg})$, chega-se a:

$$K_U \Delta x_f^{pU} = \phi_\infty - \phi_f \quad (2.44)$$

$$K_U \Delta x_g^{pU} = \phi_\infty - \phi_g \quad (2.45)$$

$$K_U \Delta x_{sg}^{pU} = \phi_\infty - \phi_{sg} \quad (2.46)$$

onde as incógnitas deste sistema são ϕ_∞ , K_U e pU . Com a solução deste sistema e para o caso em que a razão de refino da malha (q) é constante, isto é $q_{gf} = q_{sgg}$, tem-se:

$$pU = \frac{\log \left[\frac{(\phi_g - \phi_{sg})}{(\phi_f - \phi_g)} \right]}{\log(q)} \quad (2.47)$$

onde as soluções numéricas (ϕ_f) , (ϕ_g) e (ϕ_{sg}) são obtidas nas malhas fina, grossa e supergrossa, respectivamente e a razão de refino (q) é dada pela Eq. (2.39) e por:

$$q = \frac{\Delta x_{sg}}{\Delta x_g} \quad (2.48)$$

A Eq. (2.42) mostra que a incerteza (U) da solução numérica é calculada pela diferença entre a solução analítica estimada (ϕ_∞) e sua solução numérica (ϕ). O valor de ϕ_∞ é obtido por:

$$\phi_\infty = \phi_f + \frac{(\phi_f - \phi_g)}{(q^{pU} - 1)} \quad (2.49)$$

onde ϕ_∞ é a extrapolação de Richardson generalizada, baseado no cálculo da ordem aparente (pU). Substituindo a Eq. (2.49) na Eq. (2.42), a incerteza da solução numérica (ϕ_f) obtida na malha fina (Δx_f) resulta em:

$$U_{RI}(\phi_f) = \frac{(\phi_f - \phi_g)}{(q^{pU} - 1)} \quad (2.50)$$

onde U_{RI} representa o estimador de Richardson (ROACHE, 1997).

Além da magnitude da incerteza, o estimador de Richardson fornece o sinal desta magnitude, ou seja, mostrando se ϕ_∞ é maior ou menor que ϕ_f . A diferença entre ϕ_f e ϕ_g define o sinal de U_{RI} pois a razão de refino (q) será sempre maior que a unidade e a ordem assintótica (pU) será maior ou igual a unidade, fazendo com que o denominador da Eq. (2.50) seja sempre positivo.

3 PROCEDIMENTOS ANALÍTICOS E NUMÉRICOS

Este capítulo aborda os modelos matemáticos e numéricos empregados no decorrer deste trabalho. Os modelos matemáticos utilizados para realizar os estudos sobre verificação são equações unidimensionais, em regime permanente e com propriedades constantes, representadas pelas equações de Poisson, advecção-difusão e Burgers. Os modelos matemáticos estão divididos em três sub-seções, sendo que cada sub-seção detalha uma equação governante, juntamente com a particularidade acerca do termo fonte quando presente. Estão definidas sete variáveis de interesse para auxiliar no estudo do comportamento do erro numérico, neste caso, do erro de discretização. Os modelos numéricos mostram as simplificações de cada modelo matemático, como o método empregado para discretização das equações diferenciais, as condições de contorno, as formas de aplicar as condições de contorno, as funções de interpolação e as ordens encontradas *a priori* do erro de discretização. A seção dos modelos numéricos está dividida nas quatro formas de aplicar as condições de contorno, e traz uma sub-seção para mostrar os resultados obtidos *a priori* para o erro de truncamento das sete variáveis de interesse, uma tabela indicando os valores dessas ordens obtidas e dois exemplos mostrando o procedimento de obtenção dos valores das ordens assintótica (pL) e verdadeiras (pV) do erro. As equações para os coeficientes e termos fontes de cada equação com suas respectivas formas de aplicar as condições de contorno estão dispostas no Apêndice B. Aborda-se como é composta a solução analítica que serve de referência para calcular as ordens *a posteriori* da solução numérica de cada modelo matemático, ou seja, as ordens efetivas da solução numérica. E finalmente, a sub-seção solução numérica traz os dados referentes ao modo de implementação, à linguagem e aos detalhes dos equipamentos computacionais empregados para obter os resultados numéricos.

3.1 MODELOS MATEMÁTICOS

Este trabalho está fundamentado em três equações principais: equação de Poisson, que representa um problema linear de condução de calor; equação de advecção-difusão, que representa a convecção de uma propriedade física observada num meio fluido (líquido ou

gasoso) e equação de Burgers, que representa um fenômeno de convecção de quantidade de movimento não-linear.

A geometria do domínio de cálculo dos problemas matemáticos modelados pelas três equações governantes está representada pela Fig. 2.1, pois o espaço é unidimensional e o sistema de coordenadas cartesiano é referenciado pela direção x .

Como suporte para análise das equações escolhidas para representar os modelos matemáticos deste trabalho, agregam-se sete variáveis de interesse, que são:

- 1) variável dependente (ϕ) em $x = 1/2$ obtida diretamente no valor nodal ao se usar número ímpar de volumes;
- 2) variável dependente (ϕ) em $x = 1/2$ obtida pela média aritmética dos dois volumes vizinhos ao se usar número par de volumes;
- 3) média de ϕ obtida pela regra do retângulo no intervalo compreendido para x entre $[0,1]$;
- 4) média de ϕ obtida pela regra do trapézio no intervalo compreendido para x entre $[0,1]$;
- 5) média da norma (l_1) do erro de discretização de ϕ ;
- 6) derivada de primeira ordem de ϕ em $x = 0$ obtida com o esquema DDS;
- 7) derivada de primeira ordem de ϕ em $x = 0$ obtida com o esquema DDS-2.

Para a equação de Poisson foram utilizadas as sete variáveis de interesse, para as equações de advecção-difusão e Burgers foram estudadas apenas as variáveis 1, 3, 5 e 7. O capítulo 4 mostra os resultados dos erros de discretização para todas as sete variáveis, evidenciando a escolha de apenas quatro variáveis para as outras duas equações.

Para compor os modelos matemáticos das variáveis de interesse, utilizam-se as condições de contorno de Dirichlet, denotadas por:

$$\phi(x=0)=0 \text{ e } \phi(x=1)=1 \quad (3.1)$$

Em seguida, encontram-se as particularidades e os modelos matemáticos de cada uma das três equações, juntamente com as delimitações que norteiam cada uma delas.

3.1.1 Equação de Poisson

A equação de Poisson representa um problema linear de condução de calor de um escalar (ϕ) em um meio contínuo. A condução é a propagação do calor por meio do contato

de moléculas de duas ou mais substâncias com temperaturas diferentes (INCROPERA e DeWITT, 2003). A equação de Poisson é uma equação de derivadas parciais com grande aplicação em eletrostática, engenharia mecânica e física teórica.

As delimitações e simplificações assumidas para este modelo matemático são:

- equação de natureza elíptica;
- problema de caráter difusivo;
- coordenadas cartesianas;
- geometria unidimensional;
- regime permanente;
- propriedades constantes;
- com termo fonte.

A equação correspondente ao modelo matemático simplificado do problema linear de condução de calor é:

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + S = 0 \quad (3.2)$$

onde ϕ representa a propriedade de interesse e S representa o termo fonte.

A partir do método das soluções fabricadas (SHIH *et al.*, 1989; ROACHE, 1994; BOND *et al.*, 2004, 2005, 2006), o termo fonte (S) é:

$$S = -\frac{(C^2 e^{xC})}{(e^C - 1)} \quad (3.3)$$

onde C é uma constante.

3.1.2 Equação de Advecção-Difusão

A convecção é um fenômeno físico observado num meio fluido (líquido ou gasoso), onde há propagação de calor quando é submetido a um gradiente de temperatura (INCROPERA e DeWITT, 2003). Esta propagação de calor, observada na convecção, compreende dois mecanismos: a transferência de energia provocada pelo movimento molecular aleatório (difusão) e a transferência de energia pelo movimento de massa do fluido.

Alguns tipos de convecção existentes são: a convecção natural, onde as diferenças de densidades do fluido são causadas por diferenças de temperaturas; a convecção forçada, onde as forças externas representadas por um mecanismo, por exemplo por um ventilador ou uma bomba, impelem o fluido; a convecção com mudança de fase, onde os processos convectivos ocorrem numa interface líquido-gás, como a ebulição e a condensação; e a convecção mista.

As delimitações e simplificações assumidas para este modelo matemático são (FORTUNA, 2000; FOX *et al.*, 2006):

- escoamento: Newtoniano, laminar, invíscido, incompressível;
- equação de natureza parabólica;
- problema de carácter advectivo e difusivo;
- coordenadas cartesianas;
- geometria unidimensional;
- regime permanente;
- propriedades constantes;
- sem termo fonte.

A equação correspondente ao modelo matemático simplificado do problema de convecção envolvendo um agente externo é:

$$Pe \frac{d\phi}{dx} = \frac{d^2\phi}{dx^2} \quad (3.4)$$

onde Pe representa o número de Peclet.

O número de Peclet (Pe) é definido como:

$$Pe = \frac{(\rho u c_p L)}{k} \quad \text{ou} \quad Pe = \frac{(uL)}{\alpha} \quad (3.5)$$

onde a difusividade térmica (α) é representada por:

$$\alpha = \frac{k}{\rho c_p} \quad (3.6)$$

onde ρ representa massa específica [kg/m³]; u é a velocidade [m/s]; c_p representa o calor específico [J/kg.K]; L é o comprimento do domínio de cálculo [m] e k representa a condutividade térmica [W/m.K].

3.1.3 Equação de Burgers

O modelo matemático desta sub-seção envolve o fenómeno de convecção de quantidade de movimento não-linear. Este modelo está representado pela equação de Burgers que é uma equação de derivadas parciais que modela processos convectivos e que tem grande aplicação em matemática, física e engenharia. Foi introduzida por Bateman em 1915 e posteriormente estabelecida por Burgers em 1948 (ÖZIS *et al.*, 2005).

As delimitações e simplificações assumidas para este modelo matemático são:

- escoamento: Newtoniano, laminar, invíscido, incompressível;
- equação de natureza parabólica;
- problema de carácter não-linear advectivo e linear difusivo;
- coordenadas cartesianas;
- geometria unidimensional;
- regime permanente;
- propriedades constantes;
- com termo fonte.

A equação correspondente ao modelo matemático simplificado do problema de convecção de quantidade de movimento não-linear é:

$$\text{Re} \frac{d\phi^2}{dx} = \frac{d^2\phi}{dx^2} + S \quad (3.7)$$

onde Re representa o número de Reynolds e S representa o termo fonte da equação.

A partir do método das soluções fabricadas (SHIH *et al.*, 1989; ROACHE, 1994; BOND *et al.*, 2004, 2005, 2006), o termo fonte (S) é:

$$S = \text{Re}^2 e^{x\text{Re}} \frac{(2e^{x\text{Re}} - e^{\text{Re}} - 1)}{(e^{\text{Re}} - 1)^2} \quad (3.8)$$

A definição do número de Reynolds (Re) é representada por:

$$\text{Re} = \frac{(\rho u L)}{\mu} \quad (3.9)$$

onde ρ representa massa específica [kg/m³]; u é a velocidade [m/s]; L é o comprimento do domínio de cálculo [m] e μ representa a viscosidade absoluta do fluido [kg/s.m].

3.2 SOLUÇÕES ANALÍTICAS

A solução analítica do modelo numérico para a equação de advecção-difusão com as simplificações assumidas na seção anterior é:

$$\phi = \frac{(e^{xPe} - 1)}{(e^{Pe} - 1)} \quad (3.10)$$

porém, para as equações de Poisson e Burgers, ao invés do número de Peclet, empregam-se uma constante e o número de Reynolds, respectivamente.

As variáveis de interesse utilizadas pela equação de advecção-difusão e que tem solução analítica conhecida são:

- 1) variável dependente (ϕ) obtida em $x = 1/2$;
- 2) média de ($\bar{\phi}$) no intervalo de x entre $[0,1]$;
- 3) derivada de primeira ordem de (ϕ) em $x = 0$;

representadas por meio das seguintes expressões:

$$\phi(1/2) = \frac{(e^{Pe/2} - 1)}{(e^{Pe} - 1)} \quad (3.11)$$

$$\bar{\phi} = \frac{(e^{Pe} - Pe - 1)}{Pe(e^{Pe} - 1)} \quad (3.12)$$

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{Pe}{(e^{Pe} - 1)} \quad (3.13)$$

Para as equações de Poisson e Burgers, o cálculo das variáveis de interesse é feito de modo análogo, ao invés de utilizar o número de Peclet, empregam-se, novamente, uma constante e o número de Reynolds, respectivamente.

Os resultados obtidos analiticamente para as variáveis de interesse, utilizando como: constante ($C = 5,0$), número de Peclet ($Pe = 5,0$) e número de Reynolds ($Re = 5,0$), são:

Tabela 3.1: Resultados analíticos para as variáveis de interesse

VARIÁVEL DE INTERESSE	VALOR
Variável dependente (ϕ)	7,585818002124355119330617664624777313071E-02
Média de (ϕ)	1,932163450936957689039800990969872157757E-01
Derivada de 1ª ordem de (ϕ)	3,391827453152115548009950451506392112145E-02

Os valores da Tab. 3.1 foram calculados por meio do aplicativo Maple, versão 7 de 2001, fornecido por Waterloo Maple, utilizando 40 algarismos significativos. Estão em notação científica, onde E representa o expoente da base decimal (10). Assim, tem-se que a precisão da solução analítica é suficiente para servir de referência às soluções numéricas com erros de arredondamento, apresentando erros de máquina muito menores do que os presentes nas soluções numéricas. O computador empregado para resolução destas variáveis de interesse foi o CFD8 do Laboratório de Experimentação Numérica (LENA-1) da Universidade Federal do Paraná, que possui um processador Pentium 4, velocidade de 3.00 GHz, memória de 2GB de RAM e Windows xp 64 bits.

3.3 MODELOS NUMÉRICOS

Para resolver numericamente as Eqs. (3.2), (3.4) e (3.7), foi empregado o método dos volumes finitos. A discretização foi realizada em malhas estruturadas e uniformes, segundo a Fig. (2.1), com as condições de contorno do tipo Dirichlet, denotadas pela Eq. (3.1).

Foram empregadas as quatro formas de aplicar as condições de contorno: sem volume fictício, com volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero. Cada forma de aplicar as condições de contorno tem suas particularidades, como por exemplo: o cálculo da distância entre os centros dos volumes (Δx), a disposição dos volumes dos contornos e a obtenção das equações numéricas para as variáveis de interesse. Estas particularidades estão descritas nas sub-seções seguintes, segundo a forma de aplicar as condições de contorno.

As simplificações análogas às três equações governantes, que modelam o fenômeno físico numericamente, são:

- regime permanente;
- condições de contorno de Dirichlet;
- forma de aplicar condições de contorno (sem e com volume fictício, com meio-volume ou com volume de espessura zero);
- propriedades constantes.

Para a equação de Poisson, Eq. (3.2), o termo fonte é integrado analiticamente e pela regra do retângulo, quando a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício é empregada. Às outras três formas de aplicar as condições de contorno (sem volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero), a simplificação para o termo fonte é que o mesmo é integrado somente pela regra do retângulo. A equação de advecção-difusão, Eq. (3.4), não tem a presença de termo fonte. Para a equação de Burgers, Eq. (3.7), a simplificação para o termo fonte para as quatro formas de aplicar as condições de contorno é que o mesmo é integrado pela regra do retângulo.

As propriedades constantes que compõem os modelos matemáticos das três equações diferenciais estão especificadas na Tab. 3.2, onde o emprego do número de Peclet e do número de Reynolds aos modelos matemáticos vem para simplificar e adimensionalizar suas equações governantes.

Tabela 3.2: Valores constantes das propriedades dos modelos matemáticos

PROPRIEDADE	VALOR
Constante (C)	5
Número de Peclet (Pe)	5
Número de Reynolds (Re)	5

As funções de interpolação utilizadas para a equação de Poisson foram as funções predominantes para os termos difusivos, descritas na sub-seção 2.5.1 do capítulo 2, que são as Eqs. (2.10) e (2.11). As funções de interpolação empregadas para a equação de advecção-difusão foram as funções das Eqs. (2.10) e (2.11) para os termos difusivos e das Eqs. (2.14) e (2.15) para os termos advectivos. Para a equação de Burgers, que tem a presença de um termo não-linear, além das Eqs. (2.10), (2.11), (2.14) e (2.15), foram utilizadas as Eqs. (2.17) e (2.18) para empregar a correção adiada, Eq. (2.19).

As expressões que representam os coeficientes e termos fontes das três equações governantes estão descritas no Apêndice B, juntamente com as aproximações numéricas para os contornos, sendo separadas pelas quatro formas de aplicar as condições de contorno.

Para resolver o sistema de equações algébricas representado pela Eq. (2.4), ou seja, para obter os valores das soluções numéricas para a variável de interesse (ϕ), utilizou-se o *solver* TDMA (*Thomas Algorithm ou Tridiagonal Matrix Algorithm*) apresentado no capítulo 2, na sub-seção 2.7.

Para obter a solução numérica da variável de interesse (ϕ), os programas computacionais para as equações de Poisson (Eq.(3.2)) e advecção-difusão (Eq.(3.4)) realizam um algoritmo, com as seguintes rotinas:

- 1) ler dos dados de entrada (variáveis, condições iniciais, condições de contorno, número de volumes, nome do arquivo de saída) do programa;
- 2) obter os valores dos tamanhos dos volumes de controle e as distâncias entre as faces;
- 3) calcular os coeficientes e termos fontes de todos os volumes inclusive os contornos;
- 4) com o método TDMA, resolver o sistema de equações para obter (ϕ_p);
- 5) imprimir e visualizar os resultados referentes a $\phi_p(x_p)$;
- 6) calcular as sete variáveis de interesse secundárias;
- 7) imprimir e visualizar os resultados finais.

Para obter a solução numérica da variável de interesse (ϕ), o programa computacional para a equação de Burgers, Eq. (3.7), realiza um algoritmo diferenciado das Eqs. (3.2) e (3.4), pois é um fenômeno não-linear e necessita de um processo iterativo para encontrar a solução numérica. O algoritmo para esta equação é:

- 1) ler os dados de entrada (variáveis, condições iniciais, condições de contorno, número de volumes, nome do arquivo de saída) do programa;
- 2) obter os valores dos tamanhos dos volumes de controle;
- 3) calcular a solução analítica das variáveis primárias e secundárias;
- 4) fazer uma estimativa inicial do problema, assumindo $\phi_{numérico} = \Phi_{exato}$;
- 5) calcular os coeficientes e termos fontes dos volumes nos contornos;
- 6) calcular os coeficientes e termos fontes dos volumes internos;
- 7) com o método TDMA, resolver o sistema de equações para obter (ϕ_p);
- 8) calcular as variáveis de interesse secundárias;
- 9) se atingiu a convergência passar para o item 10, caso contrário, voltar ao item 6;

10) imprimir e visualizar os resultados referentes a $\phi_p(x_p)$;

11) imprimir e visualizar os resultados finais.

É um processo iterativo que envolve em seu ciclo o cálculo dos coeficientes e termos fontes de todos os volumes de controle internos, inteiros e reais, sendo resolvido pelo método direto TDMA e em seguida, calculado os valores das variáveis de interesse.

3.3.1 Condições de Contorno Aplicadas Sem Volume Fictício

Conforme a Fig. 2.1 e considerando os três modelos matemáticos propostos, a malha utilizada é estruturada e uniforme. Portanto as distâncias entre os centros dos volumes de controle são iguais e as distâncias entre as faces também são iguais, implicando que o domínio é composto por uma geometria de nós centrados entre as faces do volume e faces centradas entre os centros dos volumes. Assim, o cálculo dessa distância uniforme (Δx) é realizado por:

$$\Delta x = \frac{L}{N} \quad (3.14)$$

onde L é o comprimento do domínio de cálculo e N é o número de volumes de controle.

O refino da malha computacional está definido na seção 2.4 do capítulo 2 e foi empregado neste trabalho com duas razões: $q = 3$ para obter os valores da variável em $x = 1/2$ diretamente no centro dos volumes de controle e $q = 2$ para obter os valores da variável em $x = 1/2$ fazendo a média aritmética entre dois volumes de controle, obtendo seus valores nas faces dos volumes. Para obter o valor do número dos volumes de controle (N) com a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício foram utilizadas as seguintes equações:

$$N = (2\Delta x, 4\Delta x, 8\Delta x, \dots) \quad (3.15)$$

$$N = (3\Delta x, 9\Delta x, 27\Delta x, \dots) \quad (3.16)$$

onde Δx neste caso, indica a quantidade de volumes e não o cálculo do tamanho desses volumes que é dado pela Eq. (3.14). A Eq. (3.15) refere-se à razão de refino $q = 2$ que

fornece um número de volumes pares e a Eq. (3.16) refere-se à razão de refino $q = 3$ que fornece um número de volumes de controle ímpares.

A disposição da malha para as três equações que modelam os fenômenos de condução e convecção linear e não-linear está representado pela Fig. 2.2, que representa a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício ou volumes incorporados aos contornos com aplicação da condição de contorno de Dirichlet.

Para calcular numericamente as sete variáveis de interesse envolvidas nos modelos numéricos das três equações governantes, descritas na Tab. 3.3, foram deduzidas expressões algébricas para obter a solução numérica para cada uma destas variáveis. Abaixo, estão apresentadas as sete equações correspondentes à forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício.

- Variável dependente (ϕ) obtida em $x = 1/2$, utilizando número ímpar de volumes:

$$\phi\left(x = \frac{1}{2}\right) = \phi_p = \phi\left(\frac{N+1}{2}\right) \quad (3.17)$$

onde o valor para ϕ é obtido diretamente no valor nodal, ou seja, no centro do volume.

- Variável dependente (ϕ) obtida em $x = 1/2$, utilizando número par de volumes:

$$\phi\left(x = \frac{1}{2}\right) = \phi_p = \frac{\phi\left(\frac{N}{2}\right) + \phi\left(\frac{N}{2} + 1\right)}{2} \quad (3.18)$$

onde o valor para ϕ é obtido pela média aritmética entre dois volumes vizinhos.

- Média de (ϕ) obtida pela regra do retângulo ($0 \leq x \leq 1$):

$$\bar{\phi} = \frac{1}{L} \Delta x \sum_{p=1}^N \phi_p \quad (3.19)$$

onde Δx representa o tamanho do volume de controle.

- Média de (ϕ) obtida pela regra do trapézio (KREYSZIG, 1999) ($0 \leq x \leq 1$):

$$\bar{\phi} = \frac{1}{L} \left\{ \frac{(\phi_A + \phi_1) \Delta x}{2} + \Delta x \sum_{p=2}^N \left[\frac{(\phi_{p-1} + \phi_p)}{2} \right] + \frac{(\phi_N + \phi_B) \Delta x}{2} \right\} \quad (3.20)$$

onde ϕ_A e ϕ_B são condições prescritas no contorno, ϕ_1 e ϕ_N são o primeiro e o último volumes e, ϕ_{p-1} e ϕ_p são as soluções numéricas nos volumes oeste e principal.

- Média da norma ($L1$) do erro de discretização da variável (ϕ):

$$\bar{l}_1(Eh) = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N |\Phi_p - \phi_p| \quad (3.21)$$

onde a expressão Eh representa o erro de discretização, Φ_p representa a solução analítica no volume de controle P e ϕ_p representa a solução numérica no volume de controle P .

- Derivada de 1ª ordem de (ϕ) em $x = 0$ obtida com DDS:

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{2(\phi_1 - \phi_A)}{\Delta x} \quad (3.22)$$

onde a derivada de 1ª ordem é obtida com a utilização da função de interpolação DDS (*Downstream Differencing Scheme*) de 1ª ordem (FERZIGER e PERIC, 2002).

- Derivada de 1ª ordem de (ϕ) em $x = 0$ obtida com DDS-2:

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{9\phi_1 - \phi_2 - 8\phi_A}{3\Delta x} \quad (3.23)$$

onde a derivada de 1ª ordem é obtida com a utilização da função de interpolação DDS-2 (*Downstream Differencing Scheme*) de 2ª ordem (FERZIGER e PERIC, 2002).

3.3.2 Condições de Contorno Aplicadas Com Volume Fictício

Assim como na forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício, o cálculo da distância (Δx) é realizado em uma malha de nós centrados entre as faces e faces centradas entre os volumes. Essa distância está representada pela Eq. (3.14). O refino da malha foi realizado como na forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício, com as razões: $q = 3$ e $q = 2$. O número dos volumes de controle (N) foi obtido com as Eqs. (3.15) para volumes pares e (3.16) para volumes ímpares.

A disposição da malha para as três equações que modelam os fenômenos de condução e convecção linear e não-linear está ilustrada pela Fig. 2.3, que representa a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício com a condição de contorno de Dirichlet.

Para calcular numericamente as sete variáveis de interesse envolvidas nos modelos numéricos das três equações governantes, descritas na Tab. 3.3, foram deduzidas expressões algébricas para obter a solução numérica para cada uma destas variáveis. Abaixo, estão apresentadas três equações correspondentes à forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício, já que as outras quatro equações: Eq. (3.17), Eq. (3.18), Eq. (3.19) e Eq. (3.21), são idênticas à forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício.

- Média de (ϕ) obtida pela regra do trapézio (KREYSZIG, 1999) ($0 \leq x \leq 1$):

$$\bar{\phi} = \frac{1}{L} \left\{ \frac{(\phi_0 + \phi_1) \Delta x}{2} + \Delta x \sum_{p=2}^N \left[\frac{(\phi_{p-1} + \phi_p)}{2} \right] + \frac{(\phi_N + \phi_{N+1}) \Delta x}{2} \right\} \quad (3.24)$$

onde ϕ_0 e ϕ_{N+1} são as condições prescritas no contorno.

- Derivada de 1ª ordem de (ϕ) em $x = 0$ obtida com DDS:

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{2(\phi_1 - \phi_0)}{\Delta x} \quad (3.25)$$

- Derivada de 1ª ordem de (ϕ) em $x = 0$ obtida com DDS-2:

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{9\phi_1 - \phi_2 - 8\phi_0}{3\Delta x} \quad (3.26)$$

3.3.3 Condições de Contorno Aplicadas Com Meio-Volume

Devido a forma de aplicação da condição de contorno com meio volume sobre o contorno, a equação para calcular a distância uniforme (Δx) , dada pela Eq. (3.14), recebe uma nova formulação, sendo adaptada para:

$$\Delta x = \frac{L}{(N-1)} \quad (3.27)$$

O refino da malha foi realizado como na forma de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício, porém com as razões: $q = 2$ para obter os valores da variável em $x = 1/2$ diretamente no centro dos volumes de controle e $q = 3$ para obter os valores da variável em $x = 1/2$ fazendo a média aritmética entre dois volumes de controle. Para obter o número dos volumes de controle (N) com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume foram utilizadas as seguintes equações:

$$N = (2\Delta x + 1, 4\Delta x + 1, 8\Delta x + 1, \dots) \quad (3.28)$$

$$N = (3\Delta x + 1, 9\Delta x + 1, 27\Delta x + 1, \dots) \quad (3.29)$$

onde a Eq. (3.28) refere-se a razão de refino $q = 2$ que fornece um número de volumes de controle ímpares e a Eq. (3.29) refere-se a razão de refino $q = 3$ que fornece um número de volumes de controle pares. Para a forma com meio-volume foi utilizada razão de refino diferente das demais formas para conservar a razão de refino constante na malha.

A disposição da malha para as três equações governantes que modelam os fenômenos de condução e convecção linear e não-linear está ilustrada pela Fig. 2.4, que representa a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume nos contornos com a condição de contorno de Dirichlet.

Para calcular numericamente as sete variáveis de interesse envolvidas nos modelos numéricos das três equações governantes, descritas na Tab. 3.3, foram deduzidas expressões algébricas para obter a solução numérica para cada uma destas variáveis. Abaixo, estão apresentadas quatro equações correspondentes à forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume, já que as outras três equações: Eq. (3.17), Eq. (3.18) e Eq. (3.21), são idênticas à forma de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício.

- Média de (ϕ) obtida pela regra do retângulo ($0 \leq x \leq 1$):

$$\bar{\phi} = \frac{1}{L} \left\{ \phi_1 \frac{\Delta x}{2} + \Delta x \sum_{p=2}^{N-1} [\phi_p] + \phi_N \frac{\Delta x}{2} \right\} \quad (3.30)$$

onde ϕ_1 e ϕ_N representam os valores prescritos no contorno.

- Média de (ϕ) obtida pela regra do trapézio (KREYSZIG, 1999) ($0 \leq x \leq 1$):

$$\bar{\phi} = \frac{1}{L} \left\{ \Delta x \sum_{p=2}^N \left[\frac{(\phi_{p-1} + \phi_p)}{2} \right] \right\} \quad (3.31)$$

onde ϕ_{p-1} e ϕ_p são as soluções numéricas nos volumes oeste e principal.

- Derivada de 1ª ordem de (ϕ) em $x = 0$ obtida com DDS:

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{(\phi_2 - \phi_1)}{\Delta x} \quad (3.32)$$

- Derivada de 1ª ordem de (ϕ) em $x = 0$ obtida com DDS-2:

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{4\phi_2 - 3\phi_1 - \phi_3}{2\Delta x} \quad (3.33)$$

3.3.4 Condições de Contorno Aplicadas Com Volume de Espessura Zero

Devido à forma de aplicação da condição de contorno com volume de espessura zero sobre o contorno, a equação para calcular a distância uniforme (Δx) , dada pela Eq. (3.14), recebe uma nova formulação, sendo adaptada para:

$$\Delta x = \frac{L}{(N - 2)} \quad (3.34)$$

O refino da malha foi realizado como na forma de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício, utilizando as razões: $q = 3$ e $q = 2$. Para obter o número dos volumes de controle (N) com a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero foram utilizadas as seguintes equações:

$$N = (2\Delta x + 2, 4\Delta x + 2, 8\Delta x + 2, \dots) \quad (3.35)$$

$$N = (3\Delta x + 2, 9\Delta x + 2, 27\Delta x + 2, \dots) \quad (3.36)$$

onde a Eq. (3.35) refere-se a razão de refino $q = 2$ que fornece um número de volumes de controle pares e a Eq. (3.36) refere-se a razão de refino $q = 3$ que fornece um número de volumes de controle ímpares.

A disposição da malha para as três equações governantes que modelam os fenômenos de condução e convecção linear e não-linear está ilustrada pela Fig. 2.5, que representa a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero nos contornos com a condição de contorno de Dirichlet.

Para calcular numericamente as sete variáveis de interesse envolvidas nos modelos numéricos das três equações governantes, descritas na Tab. 3.3, foram deduzidas expressões algébricas para obter a solução numérica para cada uma destas variáveis. Abaixo, estão apresentadas quatro equações correspondentes à forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero, já que as outras três equações: Eq. (3.17), Eq. (3.18) e Eq. (3.21), são idênticas à forma de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício e com meio-volume no contorno.

- Média de (ϕ) obtida pela regra do retângulo ($0 \leq x \leq 1$):

$$\bar{\phi} = \frac{1}{L} \Delta x \sum_{p=2}^{N-1} \phi_p \quad (3.37)$$

- Média de (ϕ) obtida pela regra do trapézio (KREYSZIG, 1999) ($0 \leq x \leq 1$):

$$\bar{\phi} = \frac{1}{L} \left\{ \frac{(\phi_1 + \phi_2)}{2} \frac{\Delta x}{2} + \Delta x \sum_{p=3}^{N-1} \left[\frac{(\phi_{p-1} + \phi_p)}{2} \right] + \frac{(\phi_{N-1} + \phi_N)}{2} \frac{\Delta x}{2} \right\} \quad (3.38)$$

onde ϕ_1 e ϕ_N são as condições prescritas no contorno.

- para a derivada de 1ª ordem de (ϕ) em $x = 0$ obtida com DDS:

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{2(\phi_2 - \phi_1)}{\Delta x} \quad (3.39)$$

- para a derivada de 1ª ordem de (ϕ) em $x = 0$ obtida com DDS-2:

$$\frac{d\phi}{dx} = \frac{9\phi_2 - \phi_3 - 8\phi_1}{3\Delta x} \quad (3.40)$$

3.3.5 Análise *a Priori* da Ordem do Erro Numérico

Após a dedução das expressões para todas as variáveis de interesse, constantes no Apêndice A, construiu-se uma tabela contendo os resultados encontrados *a priori*, das ordens assintótica e verdadeiras do erro numérico. Neste trabalho assumido como erro de discretização, proporcionando uma análise qualitativa do erro de discretização antes da obtenção da solução numérica (SUERO, 2006).

Com a estimativa de erro *a priori* não é possível obter o valor do erro de discretização $E(\phi)$, mas como mostrado na Tab. 3.3, é possível obter os valores das ordens assintótica (p_L) e verdadeiras (p_V) do erro, e também, avaliar qual o efeito produzido pela redução de (Δx) sobre o erro (E).

Tabela 3.3: Resultados obtidos *a priori* das sete variáveis de interesse

VARIÁVEL DE INTERESSE	ORDENS VERDADEIRAS	ORDEM ASSINTÓTICA
1) ϕ em $x = 1/2$ (valor nodal)	$p_V = 2,4,6,\dots$	$p_L = 2$
2) ϕ em $x = 1/2$ (média arit.)	$p_V = 2,4,6,\dots$	$p_L = 2$
3) $\bar{\phi}$ com a regra do retângulo	$p_V = 2,4,6,\dots$	$p_L = 2$
4) $\bar{\phi}$ com a regra do trapézio	$p_V = 2,4,6,\dots$	$p_L = 2$
5) \bar{l}_1 do erro de discretização	$p_V = 2,4,6,\dots$	$p_L = 2$
6) $d\phi/dx$ em $x = 0$ com DDS	$p_V = 1,2,3,\dots$	$p_L = 1$
7) $d\phi/dx$ em $x = 0$ com DDS-2	$p_V = 2,3,4,\dots$	$p_L = 2$

A Tab. 3.3 mostra que as ordens verdadeira (p_V) do erro de discretização para as variáveis 1, 2 e 5 foram obtidas utilizando um esquema de 2ª ordem, chamado por diferença central. Para as variáveis 3 e 4 foram utilizadas as integrações pela regra do retângulo e pela regra do trapézio (CUNHA, 2000; CHAPRA e CANALE, 2008), onde o erro numérico é de 2ª ordem. Para as variáveis 6 e 7, foram utilizados esquemas de aproximação de 1ª ordem e 2ª ordem, respectivamente. No apêndice A encontram-se as obtenções de todas as sete variáveis de interesse. Abaixo constam dois exemplos de obtenção *a priori* dos valores das ordens verdadeiras do erro de discretização para a variável (ϕ) e para sua derivada $\left(d\phi/dx\right)$.

O procedimento empregado *a priori* é que as magnitudes dos erros de truncamento e suas ordens de convergência são obtidas por aproximações numéricas realizadas nas faces dos volumes de controle do volume principal (Fig. 2.1) (MARCHI e SILVA, 2000). Para realizar uma aproximação para a incógnita utilizando uma função de interpolação é necessário a expansão de uma série em torno das faces leste e oeste. Essa série é conhecida como série de Taylor (KREYSZIG, 1999) e é representada por:

$$\phi(x) = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{N!} \phi^{(N)}(x_0) (x - x_0)^N \quad (3.41)$$

onde $x - x_0$ representa a distância Δx . Portanto assumindo as notações:

$$\phi_e = \phi(x); \quad \phi_P = \phi\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right); \quad \phi_E = \phi\left(x + \frac{\Delta x}{2}\right) \quad (3.42)$$

e considerando a malha uniforme, as aproximações da incógnita para os volumes (P) e (E) em torno da face (e) são dadas por:

$$\phi_P = \phi_e - \phi_e' \frac{\Delta x}{2} + \phi_e'' \frac{\Delta x^2}{8} - \phi_e''' \frac{\Delta x^3}{48} + \phi_e^{IV} \frac{\Delta x^4}{384} - \phi_e^V \frac{\Delta x^5}{3840} + \phi_e^{VI} \frac{\Delta x^6}{46080} - \dots \quad (3.43)$$

$$\phi_E = \phi_e + \phi_e' \frac{\Delta x}{2} + \phi_e'' \frac{\Delta x^2}{8} + \phi_e''' \frac{\Delta x^3}{48} + \phi_e^{IV} \frac{\Delta x^4}{384} + \phi_e^V \frac{\Delta x^5}{3840} + \phi_e^{VI} \frac{\Delta x^6}{46080} + \dots \quad (3.44)$$

Somando as Eqs. (3.43) e (3.44), chega-se ao valor da Eq. (3.45), onde o primeiro termo do segundo membro representa a aproximação do esquema CDS-2 para o termo advectivo, dado pela Eq. (2.14), constante no capítulo 2. Os termos restantes da série representam o valor do erro de truncamento, dado pela Eq. (3.46).

$$\phi_e = \frac{(\phi_P + \phi_E)}{2} - \frac{1}{8} \phi_e'' \Delta x^2 - \frac{1}{384} \phi_e^{IV} \Delta x^4 - \frac{1}{46080} \phi_e^{VI} \Delta x^6 - \dots \quad (3.45)$$

$$\varepsilon_\tau[\phi_e] = -\frac{1}{8} \phi_e'' \Delta x^2 - \frac{1}{384} \phi_e^{IV} \Delta x^4 - \frac{1}{46080} \phi_e^{VI} \Delta x^6 - \dots \quad (3.46)$$

Portanto as ordens verdadeiras do erro de truncamento são representadas pelos expoentes que estão sobre os tamanhos dos volumes de controle (Δx) da Eq. (3.46), dados por $pV = 2, 4, 6, \dots$, sendo a ordem assintótica dada pelo menor dos expoentes ($pL = 2$).

Para encontrar a ordem do erro de truncamento *a priori* para a derivada da variável principal (ϕ_e') com o esquema CDS-2, subtrai-se as Eqs. (3.43) e (3.44). Assim, o primeiro termo do segundo membro representa a aproximação do esquema CDS-2 para o termo difusivo, dado pela Eq. (2.10). Os outros termos da série representam o valor do erro de truncamento, dado pela Eq. (3.48).

$$\phi_e' = \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x} - \frac{1}{24} \phi_e''' \Delta x^2 - \frac{1}{1920} \phi_e^V \Delta x^4 - \frac{1}{322560} \phi_e^{VII} \Delta x^6 - \dots \quad (3.47)$$

$$\varepsilon_\tau[\phi_e'] = -\frac{1}{24} \phi_e''' \Delta x^2 - \frac{1}{1920} \phi_e^V \Delta x^4 - \frac{1}{322560} \phi_e^{VII} \Delta x^6 - \dots \quad (3.48)$$

onde as ordens verdadeiras do erro de truncamento são dadas por $pV = 2, 4, 6, \dots$, sendo a ordem assintótica $pL = 2$.

3.4 SOLUÇÃO NUMÉRICA

A propriedade física considerada para as sete variáveis de interesse estudadas pelas equações de Poisson e advecção-difusão foi a temperatura (T) e pela equação de Burgers foi a velocidade (u). A Tab. 3.4 mostra a simbologia atribuída para as variáveis de interesse.

Tabela 3.4: Simbologia atribuída às variáveis de interesse

VARIÁVEL DE INTERESSE	SÍMBOLO	
1) ϕ em $x = 1/2$ (valor nodal)	T_{nod}	u_{nod}
2) ϕ em $x = 1/2$ (média arit.)	T_{med}	u_{med}
3) $\bar{\phi}$ com a regra do retângulo	$T_{m,ret}$	$u_{m,ret}$
4) $\bar{\phi}$ com a regra do trapézio	$T_{m,trap}$	$u_{m,trap}$
5) \bar{l}_1 do erro de discretização	E_m	
6) $d\phi/dx$ em $x = 0$ com DDS	I_{DDS}	
7) $d\phi/dx$ em $x = 0$ com DDS-2	I_{DDS-2}	

Foi realizada uma análise dos coeficientes das três equações governantes para as quatro formas de aplicar as condições de contorno. A construção dessa análise consta no Apêndice D. Com essa análise é possível presumir que os resultados dos erros das formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício e com volume de espessura zero devem ser iguais e com meio-volume, os resultados dos erros devem ser diferentes das outras três formas de aplicar as condições de contorno. Essa análise serve para complementar a discussão dos resultados obtidos *a posteriori* e que constam nos capítulos dos resultados das equações.

O tipo de projeto utilizado para criar todos os programas computacionais foi o *Fortran Console Application* e o tipo de versão utilizada foi a versão *release*. A linguagem utilizada para implementar todos os programas foi Fortran 2003 por meio do aplicativo Intel Visual Fortran 9.1, com precisão quádrupla.

Os computadores empregados para resolução dos programas computacionais foram o CFD13 do Laboratório de Experimentação Numérica (LENA-1) da Universidade Federal do Paraná (UFPR), que possui um processador Intel Core 2 Quad, velocidade de 2.4 GHz, memória de 8GB de RAM e Windows xp 64 bits e o computador CFD11 do laboratório (LENA-2) da Universidade Federal do Paraná (UFPR), que possui um processador Intel Xeon QC, velocidade de 2.66 GHz, memória de 16GB de RAM e Windows xp 64 bits.

Para cada simulação realizada, foi verificado por meio do gerenciador de tarefas da plataforma Windows, o desempenho computacional atuante durante a simulação. Os números de volumes de controle utilizados foram testados conforme a disposição de memória física na máquina empregada. Quando a simulação ultrapassava o limite da memória física disponível, a simulação era interrompida e fixava-se como limite máximo para o número de volumes, aqueles utilizados pela simulação anterior.

Para obter o tempo de processamento utilizado para execução dos cálculos computacionais nas simulações realizadas, foi considerada a função CALL CPU_TIME (t1), disponível na biblioteca do aplicativo Fortran/2003, para inicializar a contagem do tempo de processamento e CALL CPU_TIME (t2) para finalizar a contagem do tempo de processamento. Logo após os cálculos, foi definida uma variável para fazer a subtração do tempo utilizado pela simulação dada por:

$$CPU = t2 - t1 \quad (3.49)$$

No cálculo do tempo computacional, foram consideradas as sub-rotinas CALL ANALITICO e CALL NUMERICO, onde a primeira sub-rotina corresponde aos cálculos referentes à obtenção da solução analítica das variáveis de interesse de (ϕ) , como por exemplo, as variáveis descritas na seção solução analítica, e a segunda sub-rotina corresponde aos cálculos referentes à obtenção da solução numérica da variável de interesse (ϕ) e as demais variáveis de interesse descritas na seção anterior, e também constantes na Tab. 3.3.

A identificação das simulações de cada uma das três equações governantes para cada uma das quatro formas de aplicar as condições de contorno estão dispostas no Apêndice C na forma de tabelas. Cada tabela contém o nome da simulação, o número de volumes de controle, memória computacional utilizada para executar a simulação, o número de iterações externas para o problema não-linear (equação de Burgers), o valor da métrica (Δx) que representa cada malha computacional e o tempo de processamento calculado pela Eq. (3.49).

4 RESULTADOS SOBRE A EQUAÇÃO DE POISSON

Este capítulo discorre sobre os resultados encontrados para a equação de Poisson, representada pela Eq. (3.2), com o tipo de condição de contorno de Dirichlet e as quatro formas de aplicar as condições de contorno: sem e com volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero. Para o termo fonte da Eq. (3.3) são empregadas a integração analítica e a integração pela regra do retângulo, quando utilizado volume fictício para aplicar as condições de contorno. Para as outras três formas de aplicar as condições de contorno foi utilizada a integração pela regra do retângulo. Mostra os comportamentos lineares das curvas do erro de discretização entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno para as sete variáveis de interesse e compara as curvas da ordem assintótica, obtida *a priori* com as tendências das ordens efetiva e aparente do erro, obtidas *a posteriori*. Finalmente, discutem-se as razões da degeneração do erro da variável de interesse I_{DDS-2} e a definição de erro de poluição constante na solução numérica desta variável.

4.1 ERROS NUMÉRICOS DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE

Para a equação de Poisson foram realizados estudos envolvendo as sete variáveis de interesse descritas na Tab. 3.4 do capítulo 3. Também foram realizados testes envolvendo o termo fonte integrado analiticamente, indicado na legenda das figuras por fonte analítico, e pela regra do retângulo, indicado por fonte numérico. Para as duas integrações foi empregada a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício, conforme mostram os coeficientes no Apêndice B. Os valores dos erros numéricos utilizados para construir as figuras presentes neste capítulo constam em tabelas que foram construídas no Apêndice E.

Os primeiros resultados apresentados nas figuras envolvem os valores dos erros numéricos obtidos com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício. Neste contexto foram analisados os resultados para as sete variáveis de interesse comparando as duas integrações para o termo fonte. A simbologia considerada para as sete variáveis de interesse consta na Tab. 3.4.

As Figs. 4.1 a 4.4 mostram o decaimento do erro de discretização em função dos tamanhos dos volumes de controle (Δx). As malhas (M) utilizadas nas simulações, os

tamanhos dos volumes de controle e os números dos volumes de controle (N) para as formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício estão dispostos na Tab. 4.1. Para a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume estão dispostos na Tab. 4.2. E, finalmente, para a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero estão dispostos na Tab. 4.3. As colunas 2 e 3 referem-se a $q = 3$ e as colunas 4 e 5 referem-se a $q = 2$, nas Tabs. 4.1 e 4.3. Na Tab. 4.2, as colunas 2 e 3 referem-se a $q = 2$ e as colunas 4 e 5 referem-se a $q = 3$.

Tabela 4.1: Malha, tamanho e número de volumes de controle empregados com as formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício

M	Δx nodal	N	Δx média arit.	N
1	1	1	0,5	2
2	0,33333	3	0,25	4
3	0,11111	9	0,125	8
4	0,03704	27	0,0625	16
5	0,01235	81	0,03125	32
6	0,00412	243	0,01563	64
7	0,00137	729	0,00781	128
8	4,57247E-4	2.187	0,00391	256
9	1,52416E-4	6.561	0,00195	512
10	5,08053E-5	19.683	9,76563E-4	1.024
11	1,69351E-5	59.049	4,88281E-4	2.048
12	5,64503E-6	177.147	2,44141E-4	4.096
13	1,88168E-6	531.441	1,2207E-4	8.192
14	6,27225E-7	1.594.323	6,10352E-5	16.384
15	2,09075E-7	4.782.969	3,05176E-5	32.768
16	6,96917E-8	14.348.907	1,52588E-5	65.536
17	2,32306E-8	43.046.721	7,62939E-6	131.072
18			3,8147E-6	262.144
19			1,90735E-6	524.288
20			9,53674E-7	1.048.576
21			4,76837E-7	2.097.152
22			2,38419E-7	4.194.304
23			1,19209E-7	8.388.608
24			5,96046E-8	16.777.216
25			2,98023E-8	33.554.532
26			1,49012E-8	67.108.864

Na Tab. 4.1 utilizou-se 17 malhas computacionais calculando T_{nod} e 26 malhas para as outras seis variáveis de interesse, pois foram analisadas empregando-se volumes pares. Na Tab. 4.2, a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume utilizou 26 malhas calculando a variável T_{nod} e 16 malhas para as outras seis variáveis. E, a Tab. 4.3 utilizou 16 malhas obtendo T_{nod} e 25 malhas para obter as seis variáveis de interesse.

Tabela 4.2: Malha, tamanho e número de volumes de controle empregados com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume

M	Δx nodal	N	Δx média arit.	N
1	0,5	3	0,33333	4
2	0,25	5	0,11111	10
3	0,125	9	0,03704	28
4	0,0625	17	0,01235	82
5	0,03125	33	0,00412	244
6	0,01563	65	0,00137	730
7	0,00781	129	4,57247E-4	2.188
8	0,00391	257	1,52416E-4	6.562
9	0,00195	513	5,08053E-5	19.684
10	9,76563E-4	1.025	1,69351E-5	59.050
11	4,88281E-4	2.049	5,64503E-6	177.148
12	2,44141E-4	4.097	1,88168E-6	531.442
13	1,2207E-4	8.193	6,27225E-7	1.594.324
14	6,10352E-5	16.385	2,09075E-7	4.782.970
15	3,05176E-5	32.769	6,96917E-8	14.348.908
16	1,52588E-5	65.537	2,32306E-8	43.046.722
17	7,62939E-6	131.073		
18	3,8147E-6	262.145		
19	1,90735E-6	524.289		
20	9,53674E-7	1.048.577		
21	4,76837E-7	2.097.153		
22	2,38419E-7	4.194.305		
23	1,19209E-7	8.388.609		
24	5,96046E-8	16.777.217		
25	2,98023E-8	33.554.433		
26	1,49012E-8	67.108.865		

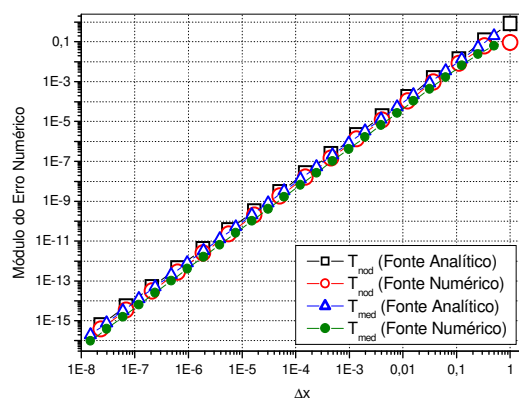


Figura 4.1: Comparação do erro das variáveis de interesse (T_{nod}) e (T_{med}) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício

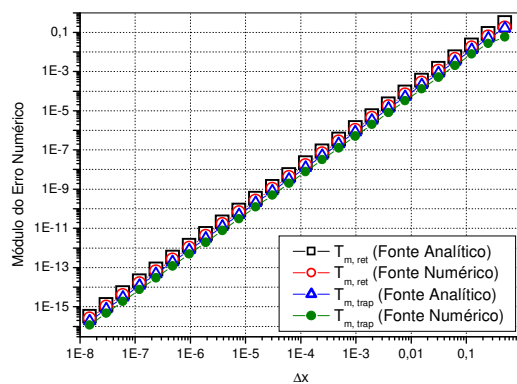


Figura 4.2: Comparação do erro das variáveis de interesse ($T_{m,ret}$) e ($T_{m,trap}$) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício

Tabela 4.3: Malha, tamanho e número de volumes de controle empregados com a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero

M	Δx nodal	N	Δx média arit.	N
1	0,33333	5	0,25	6
2	0,11111	11	0,125	10
3	0,03704	29	0,0625	18
4	0,01235	83	0,03125	34
5	0,00412	245	0,01563	66
6	0,00137	731	0,00781	130
7	4,57247E-4	2.189	0,00391	258
8	1,52416E-4	6.563	0,00195	514
9	5,08053E-5	19.685	9,76563E-4	1.026
10	1,69351E-5	59.051	4,88281E-4	2.050
11	5,64503E-6	177.149	2,44141E-4	4.098
12	1,88168E-6	531.443	1,2207E-4	8.194
13	6,27225E-7	1.594.325	6,10352E-5	16.386
14	2,09075E-7	4.782.971	3,05176E-5	32.770
15	6,96917E-8	14.348.909	1,52588E-5	65.538
16	2,32306E-8	43.046.723	7,62939E-6	131.074
17			3,8147E-6	262.146
18			1,90735E-6	524.290
19			9,53674E-7	1.048.578
20			4,76837E-7	2.097.154
21			2,38419E-7	4.194.306
22			1,19209E-7	8.388.610
23			5,96046E-8	16.777.218
24			2,98023E-8	33.554.434
25			1,49012E-8	67.108.866

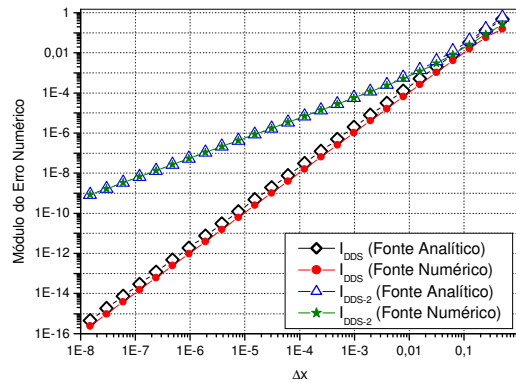


Figura 4.3: Comparação do erro das variáveis de interesse (I_{DD}) e (I_{DD-2}) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício

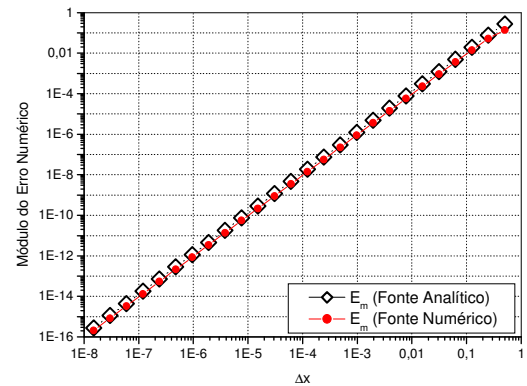


Figura 4.4: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício

A Fig. 4.1 compara os resultados dos erros numéricos para a temperatura obtida pelo valor nodal (T_{nod}), representada pela Eq. (3.17) e pela média aritmética (T_{med}), representada pela Eq. (3.18). A variável obtida em $x = 1/2$ é a variável principal do problema e fornece a solução no centro do domínio de cálculo.

A Fig. 4.2 compara os resultados dos erros numéricos para a temperatura média obtida pela regra do retângulo ($T_{m,ret}$), representada pela Eq. (3.19) e pela regra do trapézio ($T_{m,trap}$), representada pela Eq. (3.20). A obtenção de um valor médio calculado no domínio, em escoamentos, pode ser usado para calcular fluxos de massa.

A Fig. 4.3 compara os resultados dos erros numéricos para a inclinação da temperatura obtida pelo esquema de 1ª ordem (DDS), representado pela Eq. (3.22) e pelo esquema de 2ª ordem (DDS-2), representado pela Eq. (3.23). Esse resultado mostra o comportamento do fluxo de temperatura obtido na entrada do domínio de cálculo.

A Fig. 4.4 compara os resultados dos erros numéricos para a média da norma da temperatura (\bar{l}_1), representada pela Eq. (3.21), isto é, fornece o valor do erro médio (E_m) obtido no cálculo da variável principal. Os valores numéricos das Figs. 4.2, 4.3 e 4.4, foram obtidos utilizando volumes pares, para avaliar o posicionamento da variável de interesse da propriedade física obtida pela média aritmética entre dois volumes vizinhos.

Em comparação entre as duas formas de integrar o termo fonte para a equação de Poisson, os resultados tiveram um comportamento bastante semelhante. As curvas dos erros de discretização ficaram próximas com relação à variável analisada e o tipo de integração para o termo fonte. Os valores dos erros foram diminuindo linearmente conforme diminuíam-se os tamanhos dos volumes de controle (Δx). Porém, o termo fonte integrado pela regra do retângulo apresentou menor erro em relação ao fonte integrado analiticamente. Em virtude disso, adotou-se como integração para o termo fonte, modificando a forma de aplicar as condições de contorno, o fonte integrado pela regra do retângulo.

As Figs. 4.5 a 4.11 mostram o decaimento do erro de discretização em função dos tamanhos dos volumes de controle com as quatro formas de aplicar as condições de contorno. O tamanho dos volumes de controle para cada uma das formas está disposto nas Tabs. 4.1, 4.2 e 4.3, juntamente com o número de malhas utilizadas.

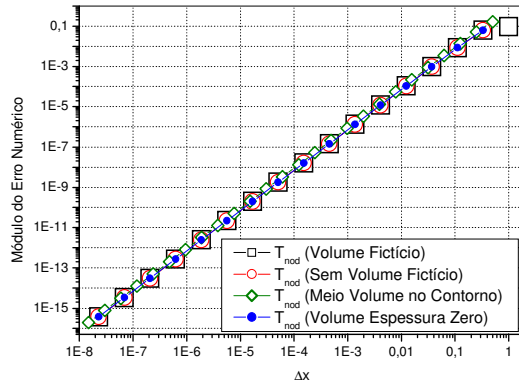


Figura 4.5: Comparação do erro da variável de interesse (T_{nod}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

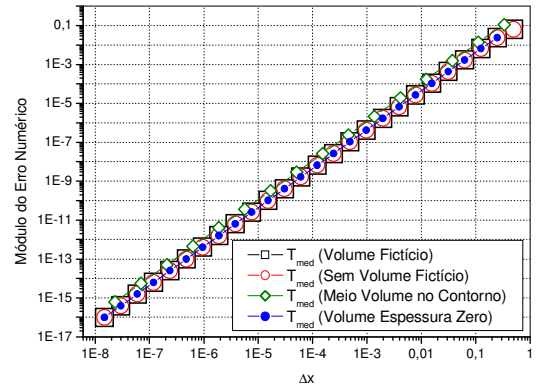


Figura 4.6: Comparação do erro da variável de interesse (T_{med}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

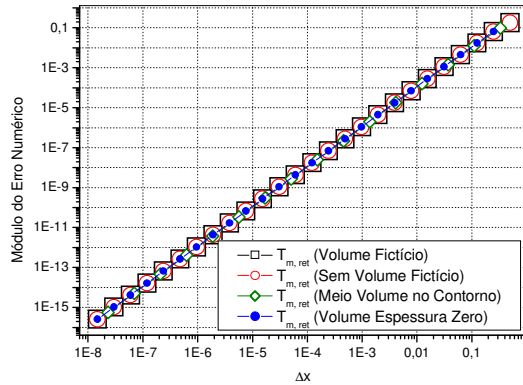


Figura 4.7: Comparação do erro da variável de interesse ($T_{m,ret}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

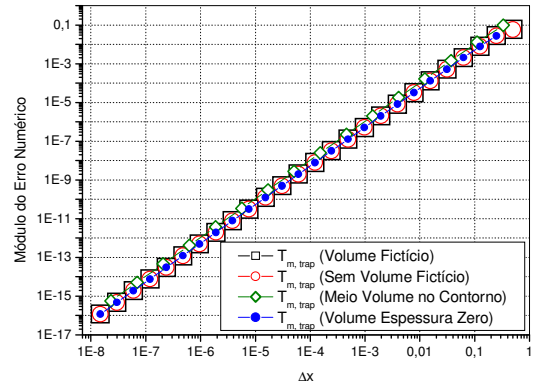


Figura 4.8: Comparação do erro da variável de interesse ($T_{m,trap}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Fazendo um estudo preliminar dos coeficientes, esperou-se que as formas de aplicar as condições de contorno sem volume fictício, com volume fictício e com volume de espessura zero tivessem os mesmos valores dos erros de discretização, pois conforme mostra o apêndice D, os valores resultantes dos coeficientes foram iguais. Isso, porém, não ocorre com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume, onde os valores das manipulações realizadas nos coeficientes foram diferentes. *A posteriori* verificou-se exatamente essa análise. Os resultados para as três formas de aplicar as condições de contorno (sem e com volume fictício e com volume de espessura zero) tiveram os valores dos erros de discretização

iguais, enquanto que a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume teve um valor diferenciado das demais formas. Esse resultado fica bastante evidente, principalmente, nas Figs. 4.10 e 4.11, onde a inclinação da temperatura é analisada.

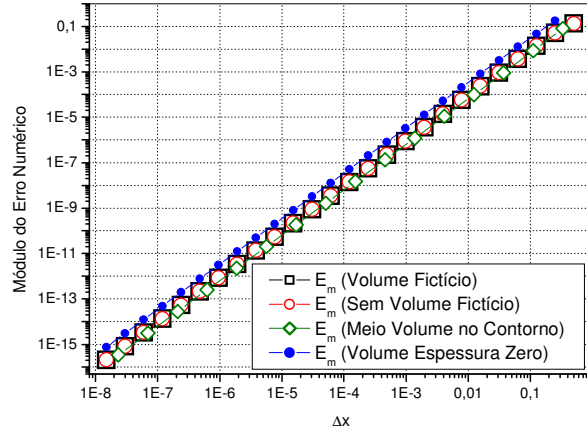


Figura 4.9: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

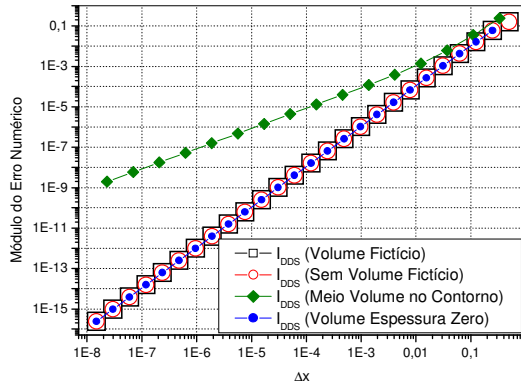


Figura 4.10: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

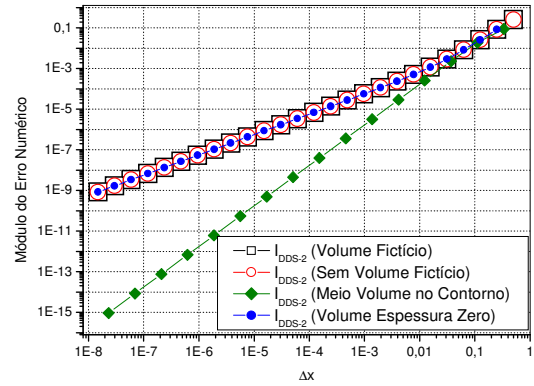


Figura 4.11: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS-2}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

A partir dos resultados apresentados pelas Figs. 4.5 a 4.11 construiu-se a Tab. 4.4, que traz a classificação das variáveis de interesse analisadas para as quatro formas de aplicar as condições de contorno, mostrando-se qual forma possui menor erro numérico.

Tabela 4.4: Classificação das variáveis de interesse para as quatro formas de aplicar as condições de contorno

VARIÁVEL DE INTERESSE	MENOR ERRO NUMÉRICO
T_{nod} T_{med} $T_{m,ret}$ $T_{m,trap}$	1º Sem volume fictício Com volume fictício Com volume de espessura zero 2º Com meio-volume
E_m	1º Com meio-volume 2º Sem volume fictício Com volume fictício 3º Com volume de espessura zero
I_{DDS}	1º Sem volume fictício Com volume fictício Com volume de espessura zero 2º Com meio-volume
I_{DDS-2}	1º Com meio-volume 2º Sem volume fictício Com volume fictício Com volume de espessura zero

As variáveis T_{nod} , T_{med} , $T_{m,ret}$ e $T_{m,trap}$ tiveram os valores dos erros numéricos do 1º e 2º lugar muito próximos entre si. A variável E_m teve as três colocações com valores também muito próximos. No caso das variáveis I_{DDS} e I_{DDS-2} a diferença do erro numérico entre o 1º e o 2º lugar é muito grande. Porém, era esperado essa diferença quantitativa de valores entre a forma com meio-volume e as outras três formas de aplicar as condições de contorno, conforme os resultados no apêndice D.

4.2 ORDENS ASSINTÓTICA, EFETIVA E APARENTE

As ordens encontradas *a priori* para o erro de discretização foram mostradas na Tab. 3.3 e registradas no apêndice A. As Figs. 4.12 a 4.18 trazem a ordem assintótica (pL) obtida pela análise *a priori* e as tendências das ordens efetiva (pE) e aparente (pU) do erro de discretização obtidas *a posteriori*. Foram analisadas as sete variáveis de interesse com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício, para o termo fonte integrado analiticamente e pela regra do retângulo.

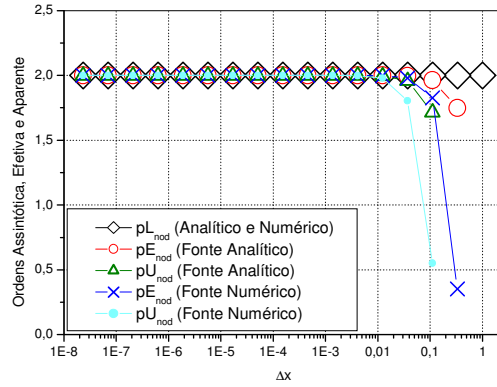


Figura 4.12: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{nod}) com as integrações analítica e regra do retângulo

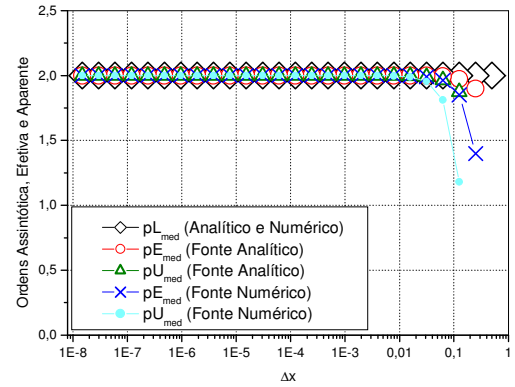


Figura 4.13: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{med}) com as integrações analítica e regra do retângulo

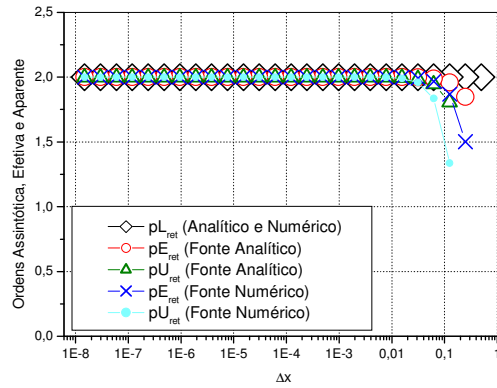


Figura 4.14: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,ret}$) com as integrações analítica e regra do retângulo

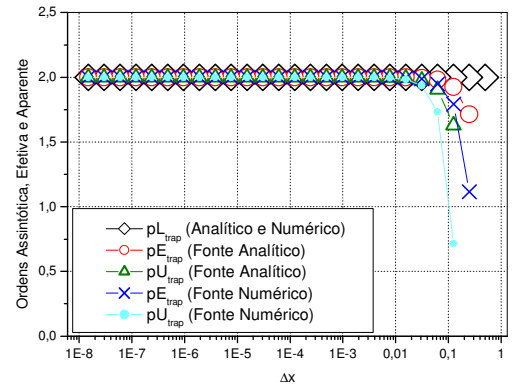


Figura 4.15: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,trap}$) com as integrações analítica e regra do retângulo

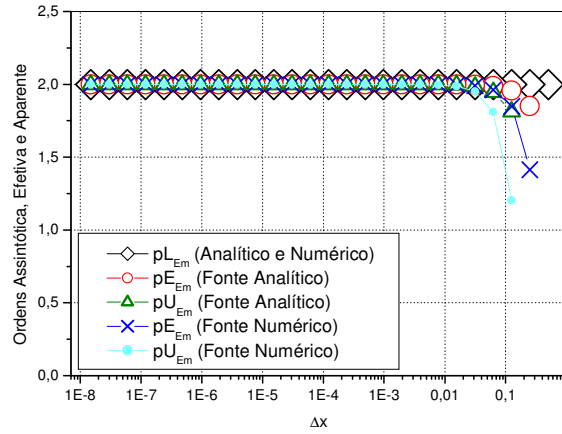


Figura 4.16: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com as integrações analítica e regra do retângulo

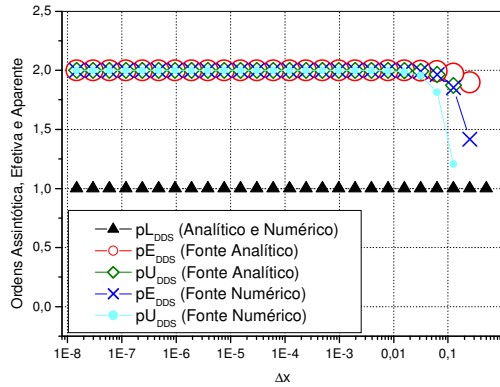


Figura 4.17: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS}) com as integrações analítica e regra do retângulo

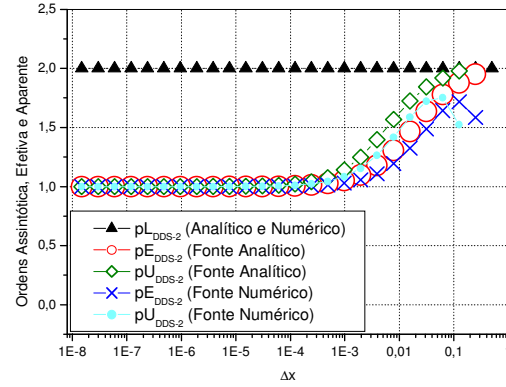


Figura 4.18: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com as integrações analítica e regra do retângulo

As ordens efetiva e aparente do erro de discretização mostradas nas Figs. 4.12 a 4.16 verificam com os valores obtidos *a priori*, Tab. 3.3. As ordens dos erros das Figs. 4.17 e 4.18 encontradas *a posteriori* têm a mesma tendência para as duas formas de integração do termo fonte. Porém, não correspondem ao esperado *a priori*, pois a ordem assintótica do esquema DDS é $pL=1$ e do esquema DDS-2 é $pL=2$. Esse mesmo resultado pode ser verificado para as formas de aplicar as condições de contorno sem volume fictício e com volume de espessura zero, pois os resultados foram qualitativamente iguais para todas as variáveis.

Com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume, as ordens do erro *a posteriori* da derivada da temperatura utilizando os esquemas DDS e DDS-2, tendem às ordens *a priori*, para 1ª e 2ª ordem, respectivamente. Como pode-se ver nas Figs. 4.19 e 4.20, à medida que $\Delta x \rightarrow 0$, as ordens $pE \rightarrow pL$ e $pU \rightarrow pL$, como era esperado.

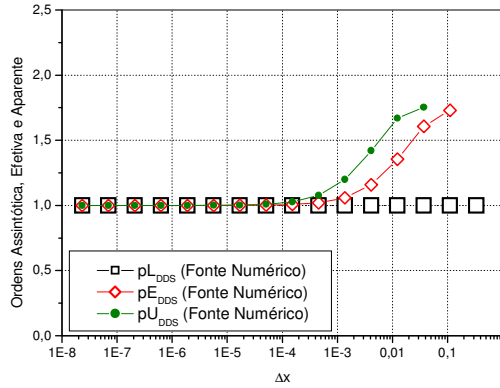


Figura 4.19: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS}) com a forma de aplicar condições de contorno com meio-volume

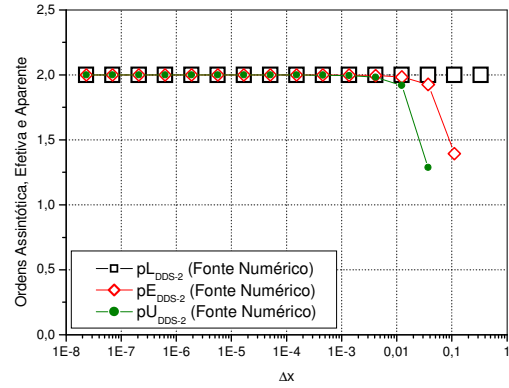


Figura 4.20: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma de aplicar condições de contorno com meio-volume

A Tab. 4.5 traz uma síntese dos resultados das ordens do erro de discretização encontrados *a priori*, mostrados na Tab. 3.3 e dos resultados obtidos *a posteriori*, para as quatro formas de aplicar as condições de contorno. Percebe-se com essa comparação que as formas sem e com volume fictício e com volume de espessura zero, para a derivada da temperatura, não confirmam as ordens do erro esperadas *a priori*, tanto empregando o esquema DDS quanto o esquema DDS-2. A forma com meio-volume confirma a tendência das ordens para todas as variáveis de interesse.

A tendência do erro não corresponder aos valores esperados *a priori* para a derivada da temperatura em $x = 0$, pode estar relacionada à forma de aplicar as condições de contorno. A derivada da temperatura é calculada em $x = 0$, ou seja, no contorno, por isso sofre a influência da forma de aplicar as condições de contorno empregadas ao modelo numérico.

Tabela 4.5: Resultados obtidos *a priori* e *a posteriori* das sete variáveis de interesse

VARIÁVEL DE INTERESSE	ORDENS <i>A PRIORI</i>	ORDENS <i>A POSTERIORI</i>
1) ϕ em $x = 1/2$ (valor nodal)	$p_V = 2, 4, 6, \dots$ onde $p_L = 2$	$p_E = 2$ e $p_U = 2$
2) ϕ em $x = 1/2$ (média arit.)	$p_V = 2, 4, 6, \dots$ onde $p_L = 2$	$p_E = 2$ e $p_U = 2$
3) $\bar{\phi}$ com a regra do retângulo	$p_V = 2, 4, 6, \dots$ onde $p_L = 2$	$p_E = 2$ e $p_U = 2$
4) $\bar{\phi}$ com a regra do trapézio	$p_V = 2, 4, 6, \dots$ onde $p_L = 2$	$p_E = 2$ e $p_U = 2$
5) \bar{l}_1 do erro de discretização	$p_V = 2, 4, 6, \dots$ onde $p_L = 2$	$p_E = 2$ e $p_U = 2$
6) $\frac{d\phi}{dx}$ em $x = 0$ com DDS	$p_V = 1, 2, 3, \dots$ onde $p_L = 1$	sem volume fictício, com volume fictício e volume de espessura zero: $p_E = 2$ e $p_U = 2$
		com meio-volume: $p_E = 1$ e $p_U = 1$
7) $\frac{d\phi}{dx}$ em $x = 0$ com DDS-2	$p_V = 2, 3, 4, \dots$ onde $p_L = 2$	sem volume fictício, com volume fictício e volume de espessura zero: $p_E = 1$ e $p_U = 1$
		com meio-volume: $p_E = 2$ e $p_U = 2$

Fazendo uma analogia com a teoria sobre volumes de faces centradas e volumes de nós centrados (PATANKAR, 1980) a derivada da temperatura no contorno esquerdo, empregando as formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício e com volume de espessura zero, é obtida em uma face, sofrendo a influência de um nó do volume adjacente, quando empregado o esquema DDS e dois nós, quando empregado o esquema DDS-2. Assim, o fator geométrico (F_w) utilizado para este caso, desenvolvido para a face oeste (w) ($x = 0$) é dado por:

$$F_w = \frac{x_P - x_w}{\Delta x_P} \quad (4.1)$$

onde $\Delta x_p = (x_e - x_w)$. Para uma malha uniforme o valor do fator geométrico é $F_w = 1/2$. A nomenclatura sugerida para este caso é valor obtido entre face/volume.

Para a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume a derivada da temperatura é obtida em um nó do volume, sofrendo a influência do valor de uma face a jusante, quando empregado o esquema DDS e duas faces a jusante, quando empregado o esquema DDS-2. Neste caso, o fator geométrico é dado por:

$$F_e = \frac{x_e - x_p}{\Delta x_e} \quad (4.2)$$

onde $\Delta x_e = (x_E - x_p)$. O valor do fator geométrico é $F_e = 1/2$ para malha uniforme. A nomenclatura sugerida para este caso é valor obtido entre volume/face.

As figuras a seguir mostram as faces e os volumes envolvidos nos cálculos dos esquemas DDS e DDS-2 com as formas de aplicar condições de contorno sem e com volume fictício e com volume de espessura zero com o posicionamento face/volume (Fig. 4.21) e com meio-volume para o posicionamento volume/face (Fig. 4.22).

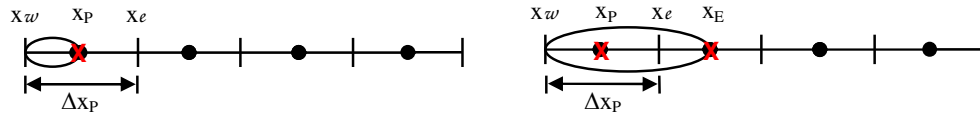


Figura 4.21: Posicionamento face/volume para as formas sem e com volume fictício e com volume de espessura zero (à esquerda = DDS; à direita = DDS-2)

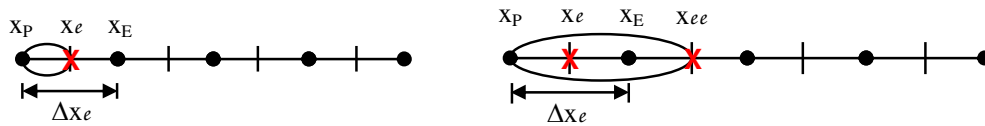


Figura 4.22: Posicionamento volume/face para a forma com meio-volume (à esquerda = DDS; à direita = DDS-2)

Schneider (2007) realizou estudos em malhas uniformes e não-uniformes e chegou aos seguintes resultados para a derivada no contorno utilizando o esquema CDS-2: quando o volume é de face centrada (VFC), a ordem da aproximação é dois, e quando o volume assume um posicionamento de nó centrado (VNC) ou qualquer construção que não seja de face centrada, a ordem da aproximação é unitária. Neste caso, o posicionamento face/volume

sofreu influência da forma de aplicar as condições de contorno, pois para o esquema DDS teve ordem dois e para o esquema DDS-2 teve ordem unitária. O posicionamento volume/face comportou-se como esperado *a priori*, o esquema DDS teve ordem unitária e o esquema DDS-2 teve a ordem do erro igual a dois.

Além da forma de aplicar as condições de contorno, a tendência do erro não corresponder aos valores esperados *a priori* para a derivada da temperatura em $x = 0$, pode estar relacionada ao erro de poluição, inerente dos erros de truncamento e discretização. No apêndice A, foram deduzidas *a priori* as ordens de todas as sete variáveis de interesse da propriedade (ϕ) . Realizando as expansões da série de Taylor em torno das faces, como exemplificam as Eqs. (3.43) e (3.44) e realizando algumas operações aritméticas entre elas, obtém-se aos valores da aproximação numérica, da ordem de truncamento e do erro de poluição que é dado por:

$$e = \frac{(E_i - E_{i-1})}{\Delta x} \quad (4.3)$$

onde (i) indica o número do volume de controle.

Segundo Marchi (2001) a denominação de erro de poluição foi introduzida por Babuska *et al.* (1997), porém com outra finalidade. Neste trabalho e em Marchi (2001), o erro de discretização é a soma dos erros de truncamento e poluição dado por:

$$E = \varepsilon_\tau + e \quad (4.4)$$

Para mostrar que a existência do erro de poluição nas soluções numéricas influencia a tendência da ordem do erro de discretização, as Figs. 4.23 e 4.24 foram construídas baseadas nos valores da ordem assintótica calculada *a priori*, das ordens efetiva e aparente calculadas *a posteriori* com os valores das soluções numéricas nodais e da ordem efetiva calculada *a posteriori* com os valores das soluções analíticas nodais. O emprego dos valores das soluções analíticas nodais implica que o resultado é exato nos centros dos volumes de controle.

As Figs. 4.23 e 4.24 apresentam os resultados para a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado analiticamente. Porém, a ordem efetiva do erro de discretização calculada com os valores das soluções analíticas nodais confirma a teoria *a priori* de erro para as outras três formas de aplicar as condições de contorno e com o termo fonte integrado pela regra do retângulo.

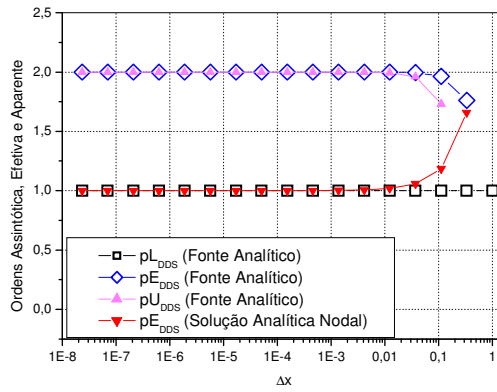


Figura 4.23: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS}) com solução analítica e numérica

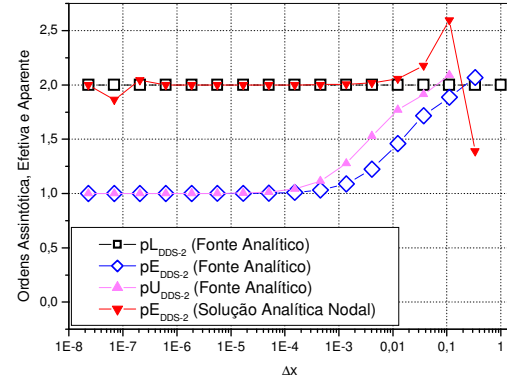


Figura 4.24: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com solução analítica e numérica

Conclui-se que analisando uma variável de interesse no contorno, a ordem do erro encontrada *a priori* não é capaz de detectar a degeneração da ordem encontrada *a posteriori*. A forma de aplicar as condições de contorno e o erro de poluição, influenciam a ordem do erro de discretização da solução de uma variável, desde que ela faça parte do contorno. Caso contrário, como mostram os resultados das cinco primeiras variáveis de interesse, constantes na Tab. 3.3, analisadas *a priori*, mantêm-se as ordens dos erros resultantes *a posteriori*. E, finalmente, a ordem aparente (pU) calculada pela Eq. (2.47) teve um excelente desempenho com relação a ordem efetiva (pE), calculada pela Eq. (2.38), pois é baseada somente nos valores das soluções numéricas. Assim, quando o modelo matemático não possuir solução analítica disponível, pode-se utilizar o cálculo da ordem aparente para verificar *a posteriori* as ordens dos erros das soluções numéricas com confiabilidade ($U \geq E$).

5 RESULTADOS SOBRE A EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO

Este capítulo mostra os resultados encontrados para a equação de advecção-difusão, representada pela Eq. (3.4), com condições de contorno de Dirichlet e as quatro formas de aplicá-las: sem e com volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero. São mostrados os resultados numéricos sobre os valores dos erros de discretização obtidos *a posteriori* para quatro variáveis e uma discussão sobre os resultados das ordens dos erros.

5.1 ERROS NUMÉRICOS DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE

Para a equação de advecção-difusão foram estudadas quatro variáveis de interesse descritas na Tab. 3.4 do capítulo 3: T_{nod} , $T_{m,ret}$, E_m e I_{DDS-2} . Os coeficientes empregados neste trabalho constam no Apêndice B. Os valores dos erros numéricos utilizados para construir as figuras presentes neste capítulo constam em tabelas do Apêndice F.

As malhas (M) utilizadas nas simulações, os tamanhos dos volumes de controle e os números dos volumes de controle (N) para as formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício estão dispostos na Tab. 5.1. Para a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume estão dispostos na Tab. 5.2. E, finalmente, para a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero estão dispostos na Tab. 5.3. As colunas 2 e 3 referem-se a $q = 3$ nas Tabs. 5.1 e 5.3 e $q = 2$ na Tab. 5.2.

Na Tab. 5.1 utilizaram-se 16 malhas computacionais para calcular T_{nod} e as outras três variáveis, que foram obtidas com volumes ímpares. Na Tab. 5.2, a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume utilizou 26 malhas para calcular as quatro variáveis de interesse. E a Tab. 5.3, com a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero, utilizou 16 malhas para obter as quatro variáveis de interesse.

As Figs. 5.1 a 5.4 mostram o decaimento do erro de discretização em função dos tamanhos dos volumes de controle com as quatro formas de aplicar as condições de contorno. O tamanho dos volumes de controle e o número de malhas utilizadas para cada uma das quatro formas de aplicar as condições de contorno estão dispostos nas Tabs. 5.1, 5.2 e 5.3.

Tabela 5.1: Malha, tamanho e número de volumes de controle empregados com as formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício

M	Δx nodal	N
1	0,33333	3
2	0,11111	9
3	0,03704	27
4	0,01235	81
5	0,00412	243
6	0,00137	729
7	4,57247E-4	2.187
8	1,52416E-4	6.561
9	5,08053E-5	19.683
10	1,69351E-5	59.049
11	5,64503E-6	177.147
12	1,88168E-6	531.441
13	6,27225E-7	1.594.323
14	2,09075E-7	4.782.969
15	6,96917E-8	14.348.907
16	2,32306E-8	43.046.721

Tabela 5.2: Malha, tamanho e número de volumes de controle empregados com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume

M	Δx nodal	N
1	0,5	3
2	0,25	5
3	0,125	9
4	0,0625	17
5	0,03125	33
6	0,01563	65
7	0,00781	129
8	0,00391	257
9	0,00195	513
10	9,76563E-4	1.025
11	4,88281E-4	2.049
12	2,44141E-4	4.097
13	1,2207E-4	8.193
14	6,10352E-5	16.385
15	3,05176E-5	32.769
16	1,52588E-5	65.537
17	7,62939E-6	131.073
18	3,8147E-6	262.145
19	1,90735E-6	524.289
20	9,53674E-7	1.048.577
21	4,76837E-7	2.097.153
22	2,38419E-7	4.194.305
23	1,19209E-7	8.388.609
24	5,96046E-8	16.777.217
25	2,98023E-8	33.554.433
26	1,49012E-8	67.108.865

Tabela 5.3: Malha, tamanho e número de volumes de controle empregados com a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero

M	Δx nodal	N
1	0,33333	5
2	0,11111	11
3	0,03704	29
4	0,01235	83
5	0,00412	245
6	0,00137	731
7	4,57247E-4	2.189
8	1,52416E-4	6.563
9	5,08053E-5	19.685
10	1,69351E-5	59.051
11	5,64503E-6	177.149
12	1,88168E-6	531.443
13	6,27225E-7	1.594.325
14	2,09075E-7	4.782.971
15	6,96917E-8	14.348.909
16	2,32306E-8	43.046.723

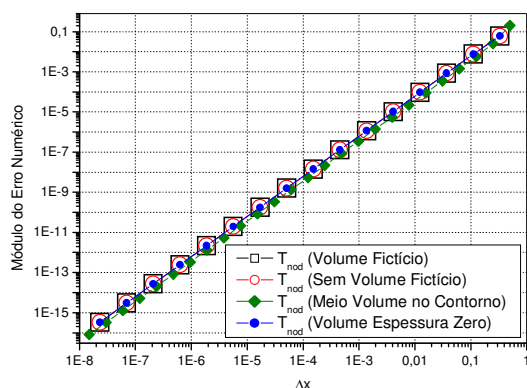


Figura 5.1: Comparação do erro da variável de interesse (T_{nod}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

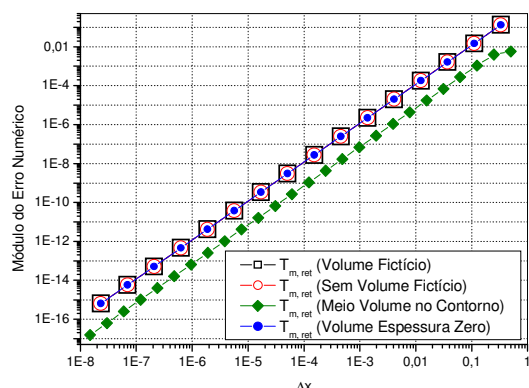


Figura 5.2: Comparação do erro da variável de interesse ($T_{m,ret}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Pela análise das Figs. 5.1 a 5.4, percebe-se que as curvas do erro de discretização tiveram um decaimento linear, além de estarem qualitativamente iguais nas Figs. 5.1, 5.2 e 5.3. Fazendo um estudo preliminar dos coeficientes, esperou-se que as formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício e com volume de espessura zero tivessem os mesmos valores dos erros de discretização, pois conforme mostra o apêndice D, os valores resultantes dos coeficientes foram iguais. Isso não ocorre com a forma de aplicar as condições

de contorno com meio-volume, onde os valores das manipulações realizadas nos coeficientes foram diferentes. *A posteriori* verificou-se exatamente essa análise. Os resultados para as três formas de aplicar as condições de contorno (sem e com volume fictício e com volume de espessura zero) tiveram os valores dos erros de discretização qualitativamente iguais, enquanto que a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume teve um valor diferenciado das demais formas. Esse resultado fica evidente, principalmente, ao analisar a variável I_{DDS-2} , na Fig. 5.4.

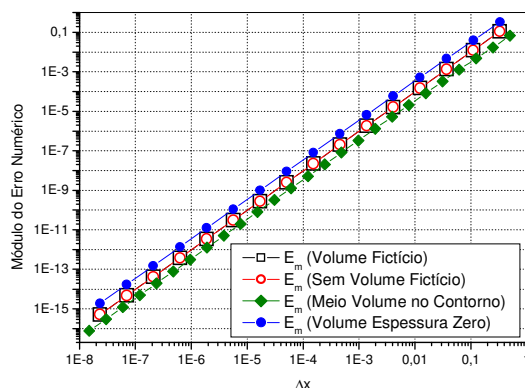


Figura 5.3: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

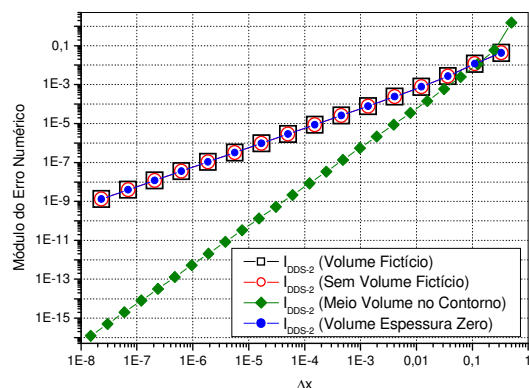


Figura 5.4: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS-2}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Tabela 5.4: Classificação das variáveis de interesse para as quatro formas de aplicar as condições de contorno

VARIÁVEL DE INTERESSE	MENOR ERRO NUMÉRICO
T_{nod} $T_{m,ret}$	1º Com meio-volume 2º Sem volume fictício Com volume fictício Com volume de espessura zero
E_m	1º Com meio-volume 2º Sem volume fictício Com volume fictício 3º Com volume de espessura zero
I_{DDS-2}	1º Com meio-volume 2º Sem volume fictício Com volume fictício Com volume de espessura zero

Com relação aos resultados apresentados pelas Figs. 5.1 a 5.4 construiu-se a Tab. 5.4, que mostra a classificação das variáveis de interesse analisadas pelas quatro formas de aplicar as condições de contorno com menor erro numérico. As variáveis T_{nod} e $T_{m,ret}$ tiveram os valores dos erros numéricos do 1º e 2º lugar qualitativamente iguais entre si. A variável E_m teve as três colocações com valores também qualitativamente iguais. No caso da variável I_{DDS-2} a diferença do erro numérico entre o 1º e o 2º lugar é bastante evidente, dando destaque à forma com meio-volume sobre o contorno.

5.2 ORDENS ASSINTÓTICA, EFETIVA E APARENTE

As ordens encontradas *a priori* do erro de discretização foram mostradas na Tab. 3.3 e registradas no apêndice A. As Figs. 5.5 a 5.13 trazem a ordem assintótica (pL) obtida pela análise *a priori* e as tendências das ordens efetiva (pE) e aparente (pU) do erro de discretização obtidas *a posteriori*. Foram analisadas as quatro variáveis de interesse com as quatro formas de aplicar as condições de contorno.

As Figs. 5.5 e 5.6 mostram o comportamento das ordens do erro da variável T_{nod} para as formas com volume fictício e com meio-volume, respectivamente. As Figs. 5.7 e 5.8 mostram o comportamento das ordens do erro para a variável $T_{m,ret}$. As Figs. 5.9 a 5.11 mostram a tendência das ordens do erro para a variável E_m e as Figs. 5.12 e 5.13 mostram o comportamento das ordens do erro de discretização para a variável I_{DDS-2} . As formas de aplicar as condições de contorno sem volume fictício e com volume de espessura zero tiveram os valores iguais à forma com volume fictício para as variáveis: T_{nod} , $T_{m,ret}$ e I_{DDS-2} . A variável E_m teve a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício com valores iguais à forma com volume fictício.

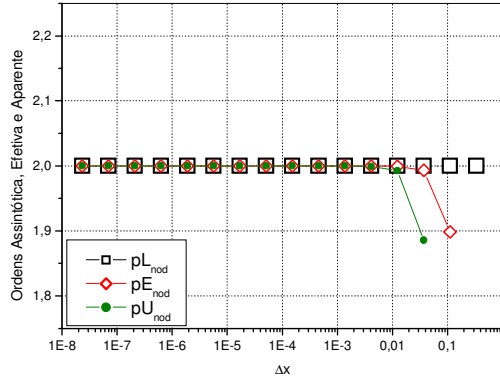


Figura 5.5: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{nod}) com a forma com volume fictício

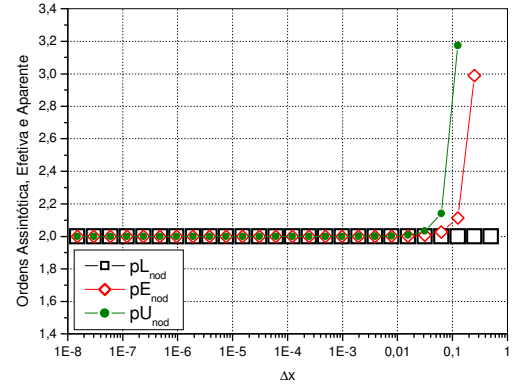


Figura 5.6: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{nod}) com a forma com meio-volume

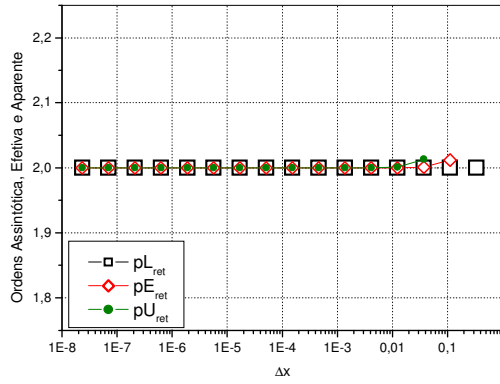


Figura 5.7: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,ret}$) com a forma com volume fictício

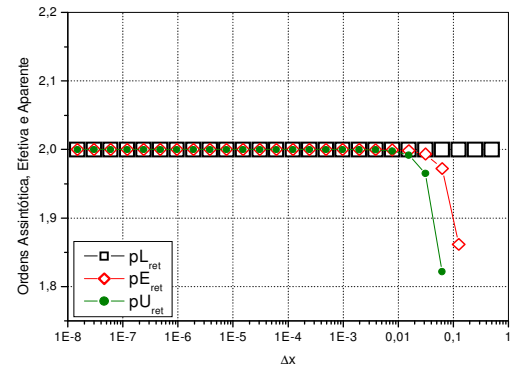


Figura 5.8: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,ret}$) com a forma com meio-volume

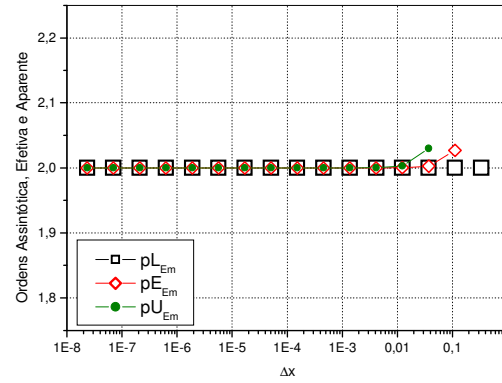


Figura 5.9: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com volume fictício

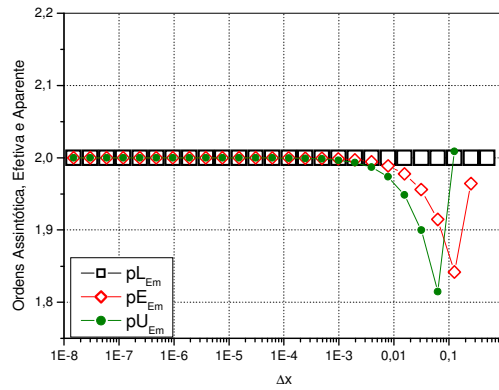


Figura 5.10: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com meio-volume

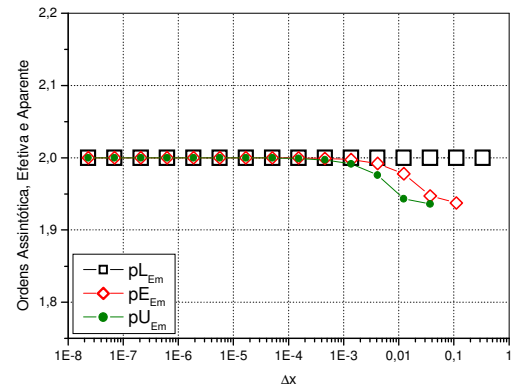


Figura 5.11: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com volume de espessura zero

As tendências das ordens obtidas *a posteriori*, confirmaram a ordem assintótica do erro de discretização, calculada *a priori*, Tab. 3.3, exceto na Fig. 5.12. As formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício e com volume de espessura zero, não obtiveram as ordens esperadas *a priori* para a variável de interesse I_{DDS-2} . A forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume teve suas ordens confirmadas com os resultados obtidos *a posteriori*.

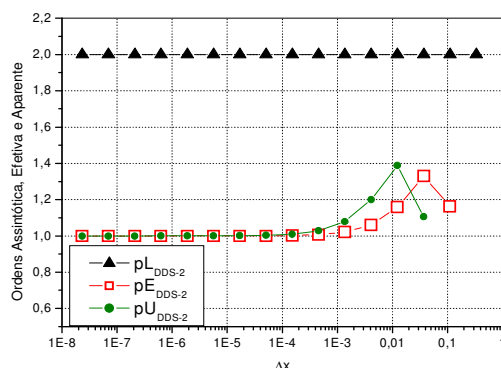


Figura 5.12: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com volume fictício

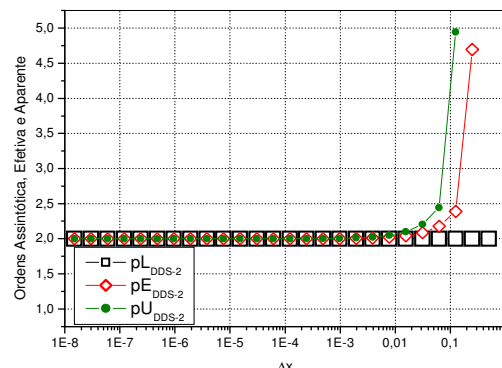


Figura 5.13: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com meio-volume

A Tab. 5.5 traz uma síntese dos resultados das ordens do erro de discretização encontrados *a priori*, mostrados na Tab. 3.3 e dos resultados obtidos *a posteriori*. Percebe-se com essa comparação que a derivada da temperatura não confirma a ordem do erro esperada *a priori* para o esquema DDS-2.

Tabela 5.5: Resultados obtidos *a priori* e *a posteriori* das quatro variáveis de interesse

VARIÁVEL DE INTERESSE	ORDENS A PRIORI	ORDENS A POSTERIORI
1) ϕ em $x = 1/2$ (valor nodal)	$p_V = 2, 4, 6, \dots$ onde $p_L = 2$	$p_E = 2$ e $p_U = 2$
2) $\bar{\phi}$ com a regra do retângulo	$p_V = 2, 4, 6, \dots$ onde $p_L = 2$	$p_E = 2$ e $p_U = 2$
3) \bar{l}_1 do erro de discretização	$p_V = 2, 4, 6, \dots$ onde $p_L = 2$	$p_E = 2$ e $p_U = 2$
4) $\frac{d\phi}{dx}$ em $x = 0$ com DDS-2	$p_V = 2, 3, 4, \dots$ onde $p_L = 2$	sem volume fictício, com volume fictício e volume de espessura zero: $p_E = 1$ e $p_U = 1$
		com meio-volume: $p_E = 2$ e $p_U = 2$

A tendência do erro não corresponder aos valores esperados *a priori* para a derivada da temperatura em $x = 0$, pode estar relacionada à forma de aplicar as condições de contorno e ao erro de poluição inerente dos erros de truncamento e discretização. Pois, conforme os resultados do capítulo 4, a derivada da temperatura é calculada em $x = 0$, ou seja, no contorno, por isso sofre a influência da forma de aplicar as condições de contorno empregadas ao modelo numérico.

A mesma analogia com a teoria sobre volumes de faces centradas e volumes de nós centrados para a derivada da temperatura no contorno esquerdo, pode ser empregado neste modelo numérico. As formas e condições de contorno empregadas foram as mesmas do capítulo 4, justamente para comparar a tendência do erro de discretização sobre o efeito físico de cada uma das equações.

O erro de poluição discutido no capítulo 4, pode estar relacionado com a tendência da ordem do erro não corresponder aos resultados esperados. A variável I_{DDS-2} teve a ordem do erro de discretização *a posteriori* degenerada, igualmente como na equação de Poisson. Portanto valem as Figs. 4.23 e 4.24, que mostram que substituindo a solução numérica nodal pela solução analítica nodal, consegue-se atingir o erro esperado *a priori*, pois a solução analítica não é contaminada por erro de poluição.

A mesma conclusão do capítulo 4 pode ser usada, pois analisando uma variável de interesse no contorno, a ordem do erro encontrada *a priori* não é capaz de detectar a degeneração da ordem encontrada *a posteriori*. A forma de aplicar as condições de contorno e o erro de poluição, influenciam a ordem do erro de discretização da solução de uma variável, desde que ela faça parte do contorno. Caso contrário, como mostram os resultados das três primeiras variáveis de interesse, constantes na Tab. 5.5, analisadas *a priori*, mantêm-se as ordens dos erros resultantes *a posteriori*. E, finalmente, a ordem aparente (pU) calculada pela Eq. (2.47) teve um excelente desempenho com relação a ordem efetiva (pE), calculada pela Eq. (2.38). Assim, quando o modelo matemático não possuir solução analítica disponível, pode-se utilizar o cálculo da ordem aparente para verificar *a posteriori* as ordens dos erros das soluções numéricas com confiabilidade.

6 RESULTADOS SOBRE A EQUAÇÃO DE BURGERS

Este capítulo mostra os resultados encontrados para a equação de Burgers, representada pela Eq. (3.7), com o tipo de condição de contorno de Dirichlet e as quatro formas de aplicar as condições de contorno: sem e com volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero. Para o termo fonte da Eq. (3.8) foi empregada a integração pela regra do retângulo. Constam os resultados numéricos sobre os valores e as ordens dos erros de discretização obtidos *a posteriori* para quatro variáveis de interesse.

6.1 ERROS NUMÉRICOS DAS VARIÁVEIS DE INTERESSE

Para a equação de Burgers foram realizados estudos envolvendo quatro variáveis de interesse descritas na Tab. 3.4 do capítulo 3: u_{nod} , $u_{m,ret}$, E_m e I_{DDS-2} . Os coeficientes empregados neste trabalho constam no Apêndice B. Os valores dos erros numéricos utilizados para construir as figuras presentes neste capítulo constam em tabelas do Apêndice G.

As malhas (M) utilizadas nas simulações, os tamanhos dos volumes e os números dos volumes de controle (N) foram definidos no capítulo 5. Para as formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício estão dispostos na Tab. 5.1. Para a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume estão dispostos na Tab. 5.2. E, finalmente, para a forma com volume de espessura zero estão dispostos na Tab. 5.3.

As Figs. 6.1 a 6.4 mostram o decaimento do erro de discretização em função dos tamanhos dos volumes de controle com as quatro formas de aplicar as condições de contorno. As curvas do erro de discretização tiveram um decaimento linear além de estarem qualitativamente iguais, exceto para a variável I_{DDS-2} , onde destaca-se a forma com meio-volume no contorno com menor erro numérico.

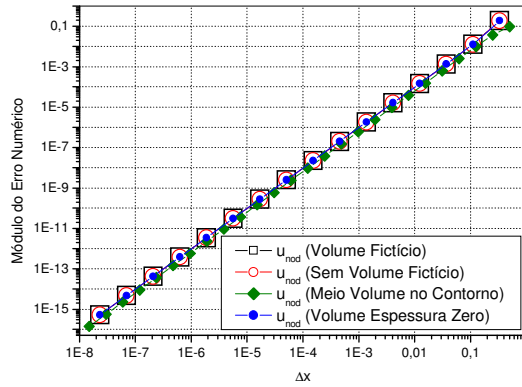


Figura 6.1: Comparação do erro da variável de interesse (u_{nod}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

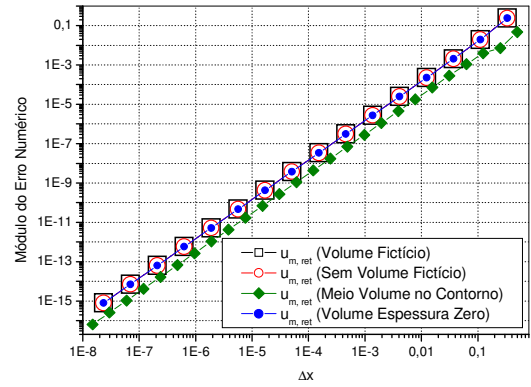


Figura 6.2: Comparação do erro da variável de interesse ($u_{m,ret}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

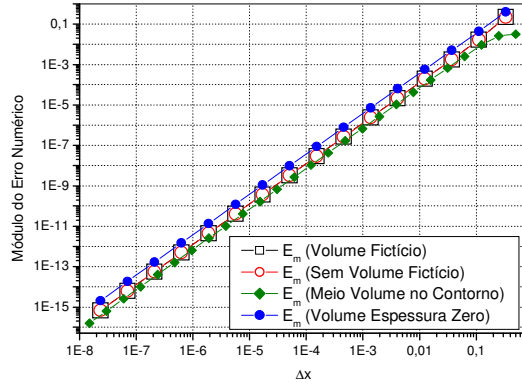


Figura 6.3: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

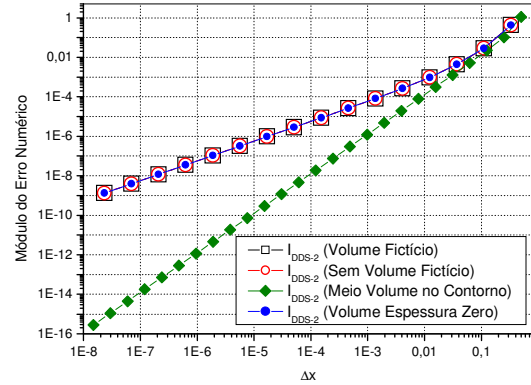


Figura 6.4: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS-2}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Por meio dos resultados apresentados pelas Figs. 6.1 a 6.4 pode-se indicar a Tab. 5.4, que mostra a classificação das variáveis de interesse analisadas pelas quatro formas de aplicar as condições de contorno com menor erro numérico. As variáveis u_{nod} e $u_{m,ret}$ tiveram os valores dos erros numéricos do 1º e 2º lugar qualitativamente iguais. A variável E_m teve as três colocações com valores também qualitativamente iguais. No caso da variável I_{DDS-2} a diferença do erro numérico entre o 1º e o 2º lugar é muito grande, o que torna a forma com meio-volume melhor, pois possui o menor erro numérico.

6.2 ORDENS ASSINTÓTICA, EFETIVA E APARENTE

As ordens encontradas *a priori* do erro de discretização foram mostradas na Tab. 3.3 e registradas no apêndice A. As Figs. 6.5 a 6.12 trazem a ordem assintótica (pL) obtida pela análise *a priori* e as tendências das ordens efetiva (pE) e aparente (pU) do erro de discretização obtidas *a posteriori*. Foram analisadas as quatro variáveis de interesse com as quatro formas de aplicar as condições de contorno. O comportamento do erro de discretização para as formas sem volume fictício e com volume de espessura zero foram análogas à forma com volume fictício.

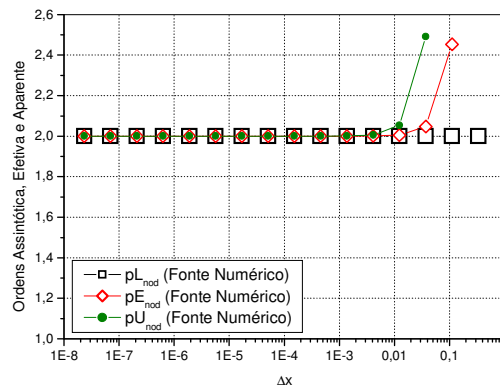


Figura 6.5: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (u_{nod}) com a forma com volume fictício

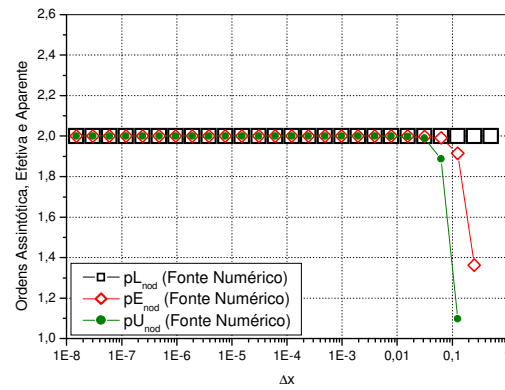


Figura 6.6: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (u_{nod}) com a forma com meio-volume

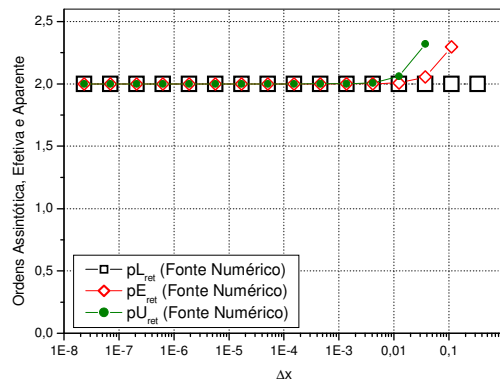


Figura 6.7: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($u_{m,ret}$) com a forma com volume fictício

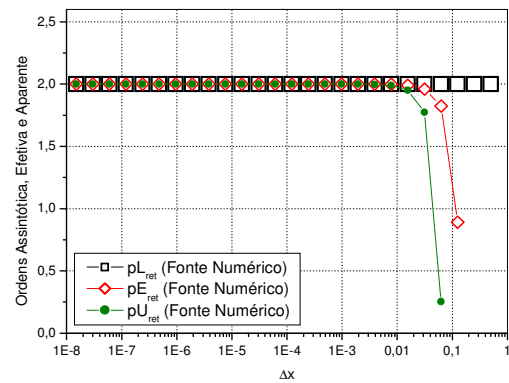


Figura 6.8: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($u_{m,ret}$) com a forma com meio-volume

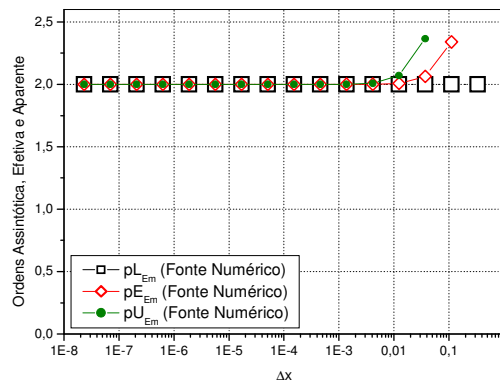


Figura 6.9: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com volume fictício

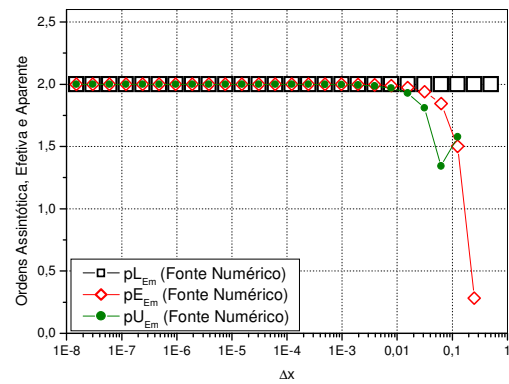


Figura 6.10: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com meio-volume

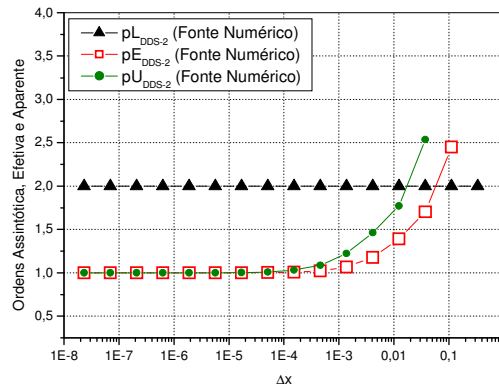


Figura 6.11: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com volume fictício

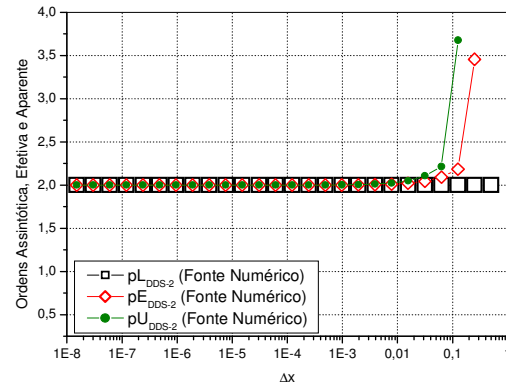


Figura 6.12: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com meio-volume

As tendências das ordens obtidas *a posteriori* confirmaram a ordem assintótica do erro de discretização, calculada *a priori*, Tab. 3.3, exceto para a Fig. 6.11. As formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício e com volume de espessura zero não obtiveram as ordens esperadas *a priori* para a variável de interesse I_{DDS-2} . A forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume, Fig. 6.12, teve suas ordens confirmadas com os resultados obtidos *a posteriori*.

A Tab. 5.5, que traz uma síntese dos resultados das ordens do erro de discretização encontrados *a priori* e *a posteriori* para o problema de advecção-difusão, serve para sintetizar os resultados obtidos para o problema não-linear deste capítulo. Percebe-se com essa comparação que a derivada da velocidade não confirma a ordem do erro esperada *a priori* para o esquema DDS-2.

A tendência do erro não corresponder aos valores esperados *a priori* para a derivada da velocidade em $x = 0$, pode estar relacionada à forma de aplicar as condições de contorno e ao erro de poluição inerente dos erros de truncamento e discretização. Pois, conforme os resultados dos capítulos 4 e 5, a derivada da velocidade é calculada em $x = 0$, ou seja, no contorno, por isso sofre a influência da forma de aplicar as condições de contorno empregadas ao modelo numérico.

A mesma analogia sobre o posicionamento face/volume e volume/face para a derivada da velocidade no contorno esquerdo, pode ser empregado neste modelo numérico. As formas

e condições de contorno empregadas foram as mesmas dos capítulos 4 e 5, justamente para comparar o comportamento do erro de discretização entre cada uma das equações.

O erro de poluição discutido no capítulo 4, pode estar relacionado com a tendência da ordem do erro não corresponder aos resultados esperados. A variável I_{DDS-2} teve a ordem do erro de discretização *a posteriori* degenerada, igualmente como nas equações de Poisson e advecção-difusão. Portanto valem as Figs. 4.23 e 4.24, que mostram que substituindo a solução numérica nodal pela solução analítica nodal, consegue-se atingir o erro esperado *a priori*, pois a solução analítica não é contaminada por erro de poluição.

As mesmas conclusões dos capítulos 4 e 5 podem ser usadas, pois analisando uma variável de interesse no contorno, a ordem do erro encontrada *a priori* não é capaz de detectar a degeneração da ordem encontrada *a posteriori*. A forma de aplicar as condições de contorno e o erro de poluição influenciam a ordem do erro de discretização da solução de uma variável, desde que ela faça parte do contorno. E, finalmente, a ordem aparente (pU) calculada pela Eq. (2.47) teve um excelente desempenho com relação a ordem efetiva (pE), calculada pela Eq. (2.38). Assim, quando o modelo matemático não possuir solução analítica disponível, pode-se utilizar o cálculo da ordem aparente para verificar *a posteriori* as ordens dos erros das soluções numéricas com confiabilidade.

7 CONCLUSÃO

Este capítulo apresenta um resumo com as principais constatações e contribuições desta dissertação. Para finalizar, são citadas sugestões de temas para trabalhos futuros, a fim de complementar os estudos realizados neste trabalho.

7.1 CONSTATAÇÕES GERAIS

Neste trabalho foram apresentadas soluções numéricas para três problemas físicos diferentes: condução e advecção-difusão de calor e escoamento de fluido. Foram utilizadas as condições de contorno de Dirichlet e quatro formas de aplicá-las: sem volume fictício, com volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero. Para cada equação foram comparados os valores dos erros de discretização entre as formas de aplicar as condições de contorno e as ordens dos erros obtidas *a priori* e *a posteriori* para sete variáveis de interesse.

Entre as formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício e com volume de espessura zero foi observado que as curvas dos erros de discretização tiveram um erro numérico qualitativamente igual ao analisar as variáveis de interesse. A forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume ficou com a curva do erro distante das demais somente ao analisar as variáveis de interesse I_{DDS} e I_{DDS-2} . A mesma observação pode ser concluída entre as três equações governantes, pois o mesmo comportamento dos valores dos erros foi obtido. As Tabs. 4.4 e 5.4 mostram resumidamente a disposição do erro numérico com relação ao menor valor obtido. Percebe-se que para as equações de advecção-difusão e Burgers, as classificações do erro com relação ao seu valor foi idêntica. Para a equação de Poisson observa-se que as variáveis T_{nod} , T_{med} , $T_{m,ret}$ e $T_{m,trap}$ tiveram a classificação do erro diferente com relação às outras duas equações. Provavelmente, o efeito advectivo presente nas equações de advecção-difusão e Burgers influenciou para que houvesse esse resultado em relação àqueles da Tab. 4.4.

As ordens obtidas *a priori* e *a posteriori* foram as mesmas obtidas entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno. Nas variáveis que avaliam a derivada de primeira ordem da propriedade de interesse (I_{DDS} e I_{DDS-2}) a ordem degenerou quando utilizadas as formas de aplicar as condições de contorno sem e com volume fictício e com volume de

espessura zero. Porém aplicando as condições de contorno com meio-volume as ordens obtidas *a posteriori* tiveram os valores previstos *a priori*, o que foi verificado para os três problemas estudados. As variáveis que mantiveram a tendência do erro para uma equação, mantiveram para as outras duas e as variáveis que tiveram a ordem do erro degenerada para uma equação, apresentaram degeneração das ordens nas outras duas.

A constatação do erro de poluição nas soluções numéricas, verificado pelas Figs. 4.23 e 4.24, mostra a importância da dedução das ordens *a priori*, pois sem este estudo preliminar, a conclusão das tendências das ordens *a posteriori* estaria equivocada. Pois não se teria o conhecimento do erro de poluição e conseqüentemente, assumiria-se como ordens assintóticas das variáveis de interesse as ordens obtidas *a posteriori*.

Finalmente, com todos os resultados obtidos, em geral, a forma de aplicar condições de contorno com meio-volume é a mais indicada, pois possui o menor erro numérico, além de não degenerar a ordem do erro para as variáveis I_{DDS} e I_{DDS-2} .

7.2 CONTRIBUIÇÕES

As contribuições do presente trabalho podem ser resumidas nos seguintes tópicos:

- para as sete variáveis de interesse estudadas foram deduzidas as ordens *a priori* do erro de truncamento, confirmando a teoria existente sobre as ordens verdadeiras (pV) da estimativa do erro numérico;
- entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno estudadas, foi mostrada qual delas possui o menor erro de discretização (E) obtido e o efeito deste erro sobre as ordens verdadeiras (pV);
- com a análise *a posteriori* das ordens dos erros de discretização foi constatado que para os casos em que o modelo matemático não possua solução analítica disponível, os valores das ordens do erro podem ser obtidos por meio da ordem aparente (pU). Pois neste estudo concluiu-se que a estimativa *a posteriori* da ordem do erro empregando a ordem aparente (pU) é tão eficaz quanto empregando a ordem efetiva (pE);
- para os três problemas físicos diferentes foi verificado que a ordem do erro de discretização teve o mesmo comportamento. As variáveis que mantiveram a tendência

do erro *a posteriori* foram as mesmas, assim como as variáveis que degeneraram o valor da ordem do erro.

7.3 TRABALHOS FUTUROS

Com a finalidade de complementar e expandir os estudos deste trabalho, são sugeridos os seguintes temas:

- verificação da mudança do tipo de condição de contorno para as quatro formas de aplicar as condições de contorno;
- expansão das equações governantes para mais dimensões espaciais para verificação da teoria empregada além do sistema unidimensional;
- assumir o estado transiente das equações para verificação do comportamento das ordens dos erros *a posteriori*;
- resolver outras equações, como equações de Navier-Stokes com escoamento laminar bidimensional;
- resolver problemas bidimensionais de convecção natural, convecção forçada e convecção mista;
- estudar modelos matemáticos referentes a fenômenos físicos diferentes, como: elasticidade e turbulência para análise de erros.

REFERÊNCIAS

AIAA. **Guide for the Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations**. AIAA G-077-1998. Reston, 1998.

AIAA. Editorial Policy Statement on Numerical and Experimental Accuracy. **AIAA Journal**, v. 47, n. 1, pp. 16-16, 2009.

ASME/JFE. Journal of Fluids Engineering Editorial Policy Statement on the Control of Numerical Accuracy. **ASME Journal of Fluid Engineering**. Disponível em: <<http://journaltool.asme.org/Content/JFENumAccuracy.pdf>>. Acesso em: 15 jan 2009.

BABUSKA, L.; IHLENBURG, F.; STROUBOULIS, T.; GANGARAJ, S. K. A Posteriori Error Estimation for Finite Element Solutions of Helmholtz' Equation. Part I: The Quality of Local Indicators and Estimators. **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 40, pp. 3443-3462, 1997.

BREBBIA, C. A.; TELLES J. C. F.; WROBEL, L. C. **Boundary Element Techniques - Theory and Applications in Engineering**. Berlin: Springer-Verlag, 1984.

BOND, R. B.; KNUPP, P. M.; OBER, C. C. A Manufactured Solution for Verifying CFD Boundary Conditions. In: 34th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit. **Proceedings...** AIAA 2004-2629. Portland - Oregon, 2004.

BOND, R. B.; KNUPP, P. M.; OBER, C. C. A Manufactured Solution for Verifying CFD Boundary Conditions, Part II. In: 43rd AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. **Proceedings...** AIAA 2005-0088. Reno - NV, 2005.

BOND, R. B.; KNUPP, P. M.; OBER, C. C. A Manufactured Solution for Verifying CFD Boundary Conditions, Part III. In: 36th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit. **Proceedings...** AIAA 2006-3722. San Francisco - CA, 2006.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. **Métodos Numéricos para Engenharia**. 5 ed. Tradução: Helena Castro. São Paulo: McGraw-Hill, 2008.

CUNHA, M. C. C. **Métodos Numéricos**. 2 ed. Campinas: Editora da Unicamp, 2000.

ELSEVIER/C&F. Note to Readers of C&F: Editor for Review Articles. **Computers & Fluids**, v. 34, pp. 641, 2005.

ELSEVIER/JCP. Uncertainty Quantification in Simulation Science. **Journal of Computational Physics**, v. 217, pp. 1-4, 2006.

FERZIGER, J. H.; PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics**. 3 ed. Berlin: Springer, 2002.

FORTUNA, A. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos**. São Paulo: Edusp, 2000.

FOX, R. W.; McDONALD, A. T.; PRITCHARD, P. J. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. 6 ed. Tradução: Ricardo Nicolau Nassar Koury e Geraldo Augusto Campolina França. Rio de Janeiro: LTC, 2006.

GALARÇA, M. M. **Análise da Distribuição de Temperatura em um Tubo de Trocadores de Calor a Alta Pressão pelo Método dos Volumes Finitos**. Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS. Porto Alegre: 2005.

Disponível em: <http://br.geocities.com/mgalarca/Example_6.pdf>. Acesso em: 15 de jan 2009.

HUGHES, T. J. R. **The Finite Element Method – Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis**. Mineola, USA: Dover Publications, Inc., 2000.

INCROPERA, F. P.; DeWITT, D. P. **Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa**. 5 ed. Tradução: Carlos Alberto Biolchini da Silva. Rio de Janeiro: LTC, 2003.

KREYSZIG, E. **Advanced Engineering Mathematics**. 8 ed. New York: Wiley, 1999.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**. Rio de Janeiro: LTC, 1995.

MARCHI, C. H. **Verificação de Soluções Numéricas Unidimensionais em Dinâmica dos Fluidos**. Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica. Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC. Florianópolis, 2001.

MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Condições Suficientes para Estimar com Acurácia e Confiabilidade Erros de Discretização em CFD. In: 20th Congresso Ibero Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia. **Proceedings...** XX CILAMCE 16.1-16.20. São Paulo, 1999.

MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Previsão de Erros de Truncamento de Modelos Numéricos em Malhas Não-Uniformes. In: 4th Simpósio Mineiro de Mecânica Computacional. **Proceedings...** IV SIMMEC, pp. 481-488. Uberlândia, 2000.

MARCHI, C. H.; SILVA, A. F. C. Unidimensional Numerical Solution Error Estimation for Convergent Apparent Order. **Numerical Heat Transfer, Part B**, v. 42, pp. 167-188, 2002.

MARCHI, C. H.; HOBMEIR, M. A. Numerical Solution of Staggered Circular Tubes in Two-Dimensional Laminar Forced Convection. **Journal of the Brazilian Society of Mechanical Science & Engineering**, v. 29, n. 1, pp. 43-48, 2007.

OBERKAMPF, W. L.; TRUCANO, T. G. Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics. **Progress in Aerospace Sciences**, v. 38, pp. 209-272, 2002.

ÖZIS, T.; ESEN, A.; KUTLUAY, S. Numerical Solution of Burgers' Equation by Quadratic B-Spline Finite Elements. **Applied Mathematics and Computations**, v. 165, pp. 237-249, 2005.

PATANKAR, S. V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Washington: Taylor & Francis, 1980.

PINTO, M. A. V.; SANTIAGO, C. D.; MARCHI, C. H. Effect of Parameters of a Multigrid Method on the CPU Time for One-Dimensional Problems. In: 18th International Congress of Mechanical Engineering. **Proceedings...** XVIII COBEM. Ouro Preto, 2005.

ROACHE, P. J. **Computational Fluid Dynamics**. Albuquerque, USA: Hermosa, 1972.

ROACHE, P. J. Perspective: A Method for Uniform Reporting of Grid Refinement Studies. **Journal of Fluids Engineering**, v.116, pp. 405-413, 1994.

ROACHE, P. J. Quantification of Uncertainty in Computational Fluid Dynamics. **Annual Reviews of Fluid Mechanics**, v. 29, pp. 60-123, 1997.

ROACHE, P. J. **Verification and Validation in Computational Science and Engineering**. Albuquerque: Hermosa Publishers, 1998.

ROACHE, P. J. Building PDE Codes to be Verifiable and Validatable. **Computing in Science & Engineering**, v. 6, pp. 30-38, 2004.

ROCHA, L. J. C. **Solidificação e Fusão de Substâncias Puras sob a Influência da Convecção Natural Laminar e Turbulenta**. Tese de Doutorado em Engenharia Mecânica. Universidade Católica do Rio de Janeiro - PUC/RIO. Rio de Janeiro, 2000.

SCHNEIDER, F. A. **Verificação de Soluções Numéricas em Problemas Difusivos e Advectivos com Malhas Não-Uniformes**. Tese de Doutorado em Métodos Numéricos em Engenharia. Universidade Federal do Paraná - UFPR. Curitiba, 2007.

SHIH, T. M., TAN, C. H., HWANG, B. C. Effects of Grid Staggering on Numerical Scheme. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 9, pp. 193-212, 1989.

SUERO, R. **Verificação de Soluções Numéricas de Escoamentos Bidimensionais Laminar em Malhas Uniformes**. Dissertação de Mestrado em Métodos Numéricos em Engenharia. Universidade Federal do Paraná - UFPR. Curitiba, 2006.

TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. **Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer**. 2 ed. Philadelphia: Taylor & Francis, 1997.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method**. 2 ed. Harlow, England: Pearson/Prentice Hall, 2007.

WEISSTEIN, E. W. **Boundary Conditions**. From *MathWorld* - A Wolfram Web Resource. Disponível em: <<http://mathworld.wolfram.com/BoundaryConditions.html>>. Acesso em: 15 jan 2009.

APÊNDICE A. Obtenção das estimativas de erros *a priori*

Para obter as ordens assintótica (pL) e verdadeiras (pV) do erro de discretização, pela estimativa de erro *a priori*, para as sete variáveis de interesse indicadas na Tab. 3.3, é necessário expandir a série de Taylor, Eq. (3.41), em torno das faces leste (e) e oeste (w). Empregando como referência geométrica a Fig. 2.1, considerando a disposição da malha uniforme e assumindo as notações dadas por:

$$\phi_w = \phi(x); \quad \phi_W = \phi\left(x - \frac{\Delta x}{2}\right); \quad \phi_P = \phi\left(x + \frac{\Delta x}{2}\right); \quad \phi_E = \phi\left(x + \frac{3\Delta x}{2}\right) \quad (\text{A.1})$$

as expansões da incógnita para os volumes (W) e (P) em torno da face (w) são:

$$\phi_W = \phi_w - \phi_w^I \frac{\Delta x}{2} + \phi_w^{II} \frac{\Delta x^2}{8} - \phi_w^{III} \frac{\Delta x^3}{48} + \phi_w^{IV} \frac{\Delta x^4}{384} - \phi_w^V \frac{\Delta x^5}{3840} + \phi_w^{VI} \frac{\Delta x^6}{46080} - \dots \quad (\text{A.2})$$

$$\phi_P = \phi_w + \phi_w^I \frac{\Delta x}{2} + \phi_w^{II} \frac{\Delta x^2}{8} + \phi_w^{III} \frac{\Delta x^3}{48} + \phi_w^{IV} \frac{\Delta x^4}{384} + \phi_w^V \frac{\Delta x^5}{3840} + \phi_w^{VI} \frac{\Delta x^6}{46080} + \dots \quad (\text{A.3})$$

Subtraindo as Eqs. (A.2) e (A.3), chega-se ao valor da Eq. (A.4), que representa a expansão da série para variável de interesse obtida no valor nodal (ϕ_{nod}). O primeiro termo do segundo membro representa a aproximação da variável com o esquema CDS-2 e os termos restantes da série representam o valor do erro de truncamento, dado pela Eq. (A.5).

$$\phi_w^I = \frac{(\phi_P - \phi_W)}{\Delta x} - \frac{1}{24} \phi_w^{III} \Delta x^2 - \frac{1}{1920} \phi_w^V \Delta x^4 - \frac{1}{322560} \phi_w^{VII} \Delta x^6 - \dots \quad (\text{A.4})$$

$$\varepsilon_\tau[\phi_w^I] = -\frac{1}{24} \phi_w^{III} \Delta x^2 - \frac{1}{1920} \phi_w^V \Delta x^4 - \frac{1}{322560} \phi_w^{VII} \Delta x^6 - \dots \quad (\text{A.5})$$

O erro de poluição da Eq. (A.4) é dado por:

$$e = \frac{(E_i - E_{i-1})}{\Delta x} \quad (\text{A.6})$$

onde E_i e E_{i-1} são os erros de discretização das soluções numéricas ϕ_P e ϕ_W , respectivamente. O erro de discretização da aproximação numérica da variável ϕ_{nod} com o esquema CDS-2, é dado por:

$$E(\phi_{nod})_i = \varepsilon(\phi_{nod})_i + e(\phi_{nod})_i \quad (A.7)$$

ou seja, ele é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição. As ordens verdadeiras do erro de truncamento para a variável ϕ_{nod} são $pV = 2, 4, 6, \dots$ onde a ordem assintótica do erro é $pL = 2$.

Somando-se as Eqs. (A.2) e (A.3), chega-se ao valor da Eq. (A.8), que representa a expansão da série para variável de interesse obtida pela média aritmética entre dois volumes vizinhos (ϕ_{med}). O primeiro termo do segundo membro representa a aproximação da variável com o esquema CDS-2 e os termos restantes da série representam o valor do erro de truncamento, dado pela Eq. (A.9).

$$\phi_w = \frac{(\phi_P + \phi_W)}{2} - \frac{1}{8} \phi_w'' \Delta x^2 - \frac{1}{384} \phi_w^{IV} \Delta x^4 - \frac{1}{46080} \phi_w^{VI} \Delta x^6 - \dots \quad (A.8)$$

$$\varepsilon_\tau[\phi_w] = -\frac{1}{8} \phi_w'' \Delta x^2 - \frac{1}{384} \phi_w^{IV} \Delta x^4 - \frac{1}{46080} \phi_w^{VI} \Delta x^6 - \dots \quad (A.9)$$

O erro de poluição da Eq. (A.8) é dado por:

$$e = \frac{(E_i + E_{i-1})}{2} \quad (A.10)$$

onde E_i e E_{i-1} são os erros de discretização das soluções numéricas ϕ_P e ϕ_W , respectivamente. O erro de discretização da aproximação numérica da variável ϕ_{med} com o esquema CDS-2, é dado por:

$$E(\phi_{med})_i = \varepsilon(\phi_{med})_i + e(\phi_{med})_i \quad (A.11)$$

ou seja, ele é igual à soma do seu erro de truncamento com o seu erro de poluição. As ordens verdadeiras do erro de truncamento para a variável ϕ_{med} são $pV = 2, 4, 6, \dots$ onde a ordem assintótica do erro é $pL = 2$.

A média da variável (ϕ) é calculada por:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{L} \int_0^L \phi(x) dx \quad (\text{A.12})$$

substituindo a Eq. (A.4) na Eq. (A.12) tem-se:

$$\bar{\phi}_w' = \frac{1}{L} \sum_{p=1}^N \left[(\phi_p - \phi_w) - \frac{1}{24} \phi_w''' \Delta x^3 - \frac{1}{1920} \phi_w^{IV} \Delta x^5 - \frac{1}{322560} \phi_w^{VI} \Delta x^7 - \dots \right] \quad (\text{A.13})$$

onde $\bar{\phi}_w'$ representa a média variável ϕ pela regra do retângulo. Porém, conforme Cunha (2000) e Chapra e Canale (2008) o erro da regra do retângulo pode ser estimado por:

$$ER = -n \left(\frac{\Delta x^3}{24} \right) \phi_w''' = -(b-a) \frac{\Delta x^2}{24} \phi_w''' \quad (\text{A.14})$$

onde foi realizado a substituição $n\Delta x = (b-a)$. Portanto, o erro de truncamento da média da variável ϕ é a Eq. (A.5) e as ordens verdadeiras do erro de truncamento são $pV = 2, 4, 6, \dots$ onde a ordem assintótica do erro é $pL = 2$. O erro de poluição é dado por:

$$e = E_i - E_{i-1} \quad (\text{A.15})$$

e o erro de discretização é:

$$E(\bar{\phi})_i = \varepsilon(\bar{\phi})_i + e(\bar{\phi})_i \quad (\text{A.16})$$

Para obter a média da variável ϕ pela regra do trapézio o procedimento é semelhante. Substituindo a Eq. (A.8) na Eq. (A.12) tem-se:

$$\bar{\phi}_w = \frac{1}{L} \sum_{p=2}^N \left[\frac{(\phi_p + \phi_w)}{2} \Delta x - \frac{1}{8} \phi_w'' \Delta x^3 - \frac{1}{384} \phi_w^{IV} \Delta x^5 - \frac{1}{46080} \phi_w^{VI} \Delta x^7 - \dots \right] \quad (\text{A.17})$$

Conforme Cunha (2000) e Chapra e Canale (2008) o erro da regra do trapézio pode ser estimado por meio da Eq. (A.14). Assim, as ordens verdadeiras do erro de truncamento são $pV = 2, 4, 6, \dots$ onde a ordem assintótica do erro é $pL = 2$. O erro de poluição é dado por:

$$e = \frac{(E_i + E_{i-1})}{2} \Delta x \quad (\text{A.18})$$

e o erro de discretização é dado pela Eq. (A.16).

A média da norma (\bar{l}_1) é calculada por:

$$\bar{l}_1 = \frac{(\Phi - \phi)}{N} \quad (\text{A.19})$$

substituindo a Eq. (A.4) na Eq. (A.19) tem-se:

$$\bar{l}_1(\phi_w^I) = \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N \left[\left(\frac{\phi_w - \phi_p}{\Delta x} \right) - \frac{1}{24} \phi_w^{III} \Delta x^2 - \frac{1}{1920} \phi_w^V \Delta x^4 - \frac{1}{322560} \phi_w^{VII} \Delta x^6 - \dots \right] \quad (\text{A.20})$$

onde $\bar{l}_1(\phi_w^I)$ representa a média da norma da variável ϕ . O erro de truncamento é dado pela Eq. (A.5), o erro de poluição é dado pela Eq. (A.6) e o erro de discretização é dado pela Eq. (A.7). As ordens verdadeiras do erro de truncamento são $pV = 2, 4, 6, \dots$ onde a ordem assintótica do erro é $pL = 2$.

A aproximação para a derivada de 1ª ordem da variável ϕ em $x = 0$ é obtida isolando a derivada de 1ª ordem da Eq. (A.3), dada por:

$$\phi_w^I = 2 \frac{(\phi_p - \phi_w)}{\Delta x} - \phi_w^{II} \frac{\Delta x}{4} - \phi_w^{III} \frac{\Delta x^2}{24} - \phi_w^{IV} \frac{\Delta x^3}{192} + \phi_w^V \frac{\Delta x^4}{1920} + \phi_w^{VI} \frac{\Delta x^5}{23040} + \dots \quad (\text{A.21})$$

onde o erro de truncamento é:

$$\varepsilon_\tau[\phi_w^I] = -\frac{1}{4} \phi_w^{II} \Delta x - \frac{1}{24} \phi_w^{III} \Delta x^2 - \frac{1}{192} \phi_w^{IV} \Delta x^3 - \frac{1}{1920} \phi_w^V \Delta x^4 - \frac{1}{23040} \phi_w^{VI} \Delta x^5 - \dots \quad (\text{A.22})$$

O erro de poluição da Eq. (A.21) é dado por:

$$e = 2 \frac{(E_i - E_{j-1})}{\Delta x} \quad (\text{A.23})$$

onde E_{j-1} é o erro de discretização da solução numérica de ϕ na face w (ϕ_w). O erro de discretização da aproximação numérica para a derivada de 1ª ordem da variável ϕ com o esquema DDS, é dado pela Eq. (A.24). As ordens verdadeiras do erro de truncamento são $pV = 1, 2, 3, \dots$ onde a ordem assintótica do erro é $pL = 1$.

$$E(\phi_w^I)_i = \varepsilon(\phi_w^I)_i + e(\phi_w^I)_i \quad (\text{A.24})$$

Fazendo uma expansão da incógnita para o volume (E) em torno da face (w) tem-se:

$$\phi_E = \phi_w + \phi_w' \frac{3\Delta x}{2} + \phi_w'' \frac{9\Delta x^2}{8} + \phi_w''' \frac{27\Delta x^3}{48} + \phi_w^{IV} \frac{81\Delta x^4}{384} + \phi_w^V \frac{243\Delta x^5}{3840} + \dots \quad (\text{A.25})$$

Multiplicando a Eq. (A.3) por -2 e somando com a Eq. (A.25) tem-se:

$$\phi_w' = \frac{(9\phi_E - \phi_P - 8\phi_w)}{3\Delta x} + \frac{6}{48}\phi_w''' \Delta x^2 + \frac{1}{16}\phi_w^{IV} \Delta x^3 + \frac{13}{640}\phi_w^V \Delta x^4 + \dots \quad (\text{A.26})$$

onde o erro de truncamento é dado pela Eq. (A.27) e o erro de poluição pela Eq. (A.28).

$$\varepsilon_\tau [\phi_w'] = \frac{6}{48}\phi_w''' \Delta x^2 + \frac{1}{16}\phi_w^{IV} \Delta x^3 + \frac{13}{640}\phi_w^V \Delta x^4 + \dots \quad (\text{A.27})$$

$$e = \frac{(9E_{i+1} - E_i - 8E_{j-1})}{3\Delta x} \quad (\text{A.28})$$

O erro de discretização da aproximação numérica para a derivada de 1ª ordem da variável ϕ com o esquema DDS-2, é dado pela Eq. (A.24). As ordens verdadeiras do erro de truncamento são $pV = 2, 4, 6, \dots$ onde a ordem assintótica do erro é $pL = 2$.

APÊNDICE B. Coeficientes e termos fontes das equações governantes

As equações de Poisson, advecção-difusão e Burgers foram discretizadas pelo método dos volumes finitos, utilizando as funções de interpolação CDS-2 e o tipo de condição de contorno de Dirichlet, como mostra a Eq. (B.1). Os coeficientes e termos fontes das três equações foram obtidos a partir da equação algébrica linearizada dada pela Eq. (B.2).

$$\phi(x=0) = \phi_a \quad \text{e} \quad \phi(x=L) = \phi_b \quad (\text{B.1})$$

$$a_p \phi_P = a_w \phi_W + a_e \phi_E + b_p \quad (\text{B.2})$$

EQUAÇÃO DE POISSON

A equação de Poisson é dada pela Eq. (B.3) e seu termo fonte (S) pela Eq. (B.4). Os coeficientes e termos fontes foram obtidos com as quatro formas de aplicar as condições de contorno: sem volume fictício, com volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero. A forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício foi dividida em duas etapas: primeiro, o termo fonte integrado analiticamente e em seguida, o termo fonte integrado pela regra do retângulo.

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} + S = 0 \quad (\text{B.3})$$

$$S = -\frac{(C^2 e^{xC})}{(e^C - 1)} \quad (\text{B.4})$$

Condições de Contorno Aplicadas Sem Volume Fictício

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício são dados por:

- para o volume de controle $P = 1$:

$$a_w = 0 \quad (\text{B.5})$$

$$a_e = \frac{1}{\Delta x} \quad (\text{B.6})$$

$$a_p = a_e + \frac{2}{\Delta x} \quad (\text{B.7})$$

$$b_p = \frac{2}{\Delta x} \phi_a - \frac{(C^2 e^{x_p C})}{(e^C - 1)} \Delta x_p \quad (\text{B.8})$$

- para os volumes de controle entre $P = 2$ a $P = N - 1$:

$$a_w = \frac{1}{\Delta x} \quad (\text{B.9})$$

$$a_e = \frac{1}{\Delta x} \quad (\text{B.10})$$

$$a_p = a_w + a_e \quad (\text{B.11})$$

$$b_p = -\frac{(C^2 e^{x_p C})}{(e^C - 1)} \Delta x_p \quad (\text{B.12})$$

- para o volume de controle $P = N$:

$$a_w = \frac{1}{\Delta x} \quad (\text{B.13})$$

$$a_e = 0 \quad (\text{B.14})$$

$$a_p = a_w + \frac{2}{\Delta x} \quad (\text{B.15})$$

$$b_p = \frac{2}{\Delta x} \phi_b - \frac{(C^2 e^{x_p C})}{(e^C - 1)} \Delta x_p \quad (\text{B.16})$$

Condições de Contorno Aplicadas Com Volume Fictício

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício são divididos em duas etapas: termo fonte integrado analiticamente e termo fonte integrado pela regra do retângulo.

- Termo Fonte Integrado Analiticamente

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado analiticamente são dados por:

- para o volume de controle $P = 0$:

$$a_w = 0 \quad (\text{B.17})$$

$$a_e = -1 \quad (\text{B.18})$$

$$a_p = 1 \quad (\text{B.19})$$

$$b_p = 2\phi_a \quad (\text{B.20})$$

- para os volumes de controle entre $P = 1$ a $P = N$ são empregadas as Eqs. (B.9), (B.10) e (B.11) para os coeficientes a_w , a_e e a_p , respectivamente. O termo b_p é dado por:

$$b_p = -\frac{(Ce^{xeC})}{(e^C - 1)} + \frac{(Ce^{xwC})}{(e^C - 1)} \quad (\text{B.21})$$

- para o volume de controle $P = N + 1$:

$$a_w = -1 \quad (\text{B.22})$$

$$a_e = 0 \quad (\text{B.23})$$

$$a_p = 1 \quad (\text{B.24})$$

$$b_p = 2\phi_b \quad (\text{B.25})$$

- Termo Fonte Integrado pela Regra do Retângulo

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado pela regra do retângulo são dados por:

- para o volume de controle $P = 0$ são empregadas as Eqs. (B.17), (B.18), (B.19) e (B.20) para os coeficientes a_w , a_e , a_p e b_p , respectivamente.
- para os volumes de controle entre $P = 1$ a $P = N$ são empregadas as Eqs. (B.9), (B.10), (B.11) e (B.12).
- para o volume de controle $P = N + 1$ são empregadas as Eqs. (B.22), (B.23), (B.24) e (B.25).

Condições de Contorno Aplicadas Com Meio-Volume

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume são dados por:

- para o volume de controle $P = 1$:

$$a_w = 0 \quad (B.26)$$

$$a_e = 0 \quad (B.27)$$

$$a_p = 1 \quad (B.28)$$

$$b_p = \phi_a \quad (B.29)$$

- para os volumes de controle entre $P = 2$ a $P = N - 1$ são empregadas as Eqs. (B.9), (B.10), (B.11) e (B.12).
- para o volume de controle $P = N$:

$$a_w = 0 \quad (B.30)$$

$$a_e = 0 \quad (B.31)$$

$$a_p = 1 \quad (B.32)$$

$$b_p = \phi_b \quad (\text{B.33})$$

Condições de Contorno Aplicadas Com Volume de Espessura Zero

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero são dados por:

- para o volume de controle $P = 1$ são empregadas as Eqs. (B.26), (B.27), (B.28) e (B.29).
- para o volume de controle $P = 2$:

$$a_w = \frac{2}{\Delta x} \quad (\text{B.34})$$

$$a_e = \frac{1}{\Delta x} \quad (\text{B.35})$$

$$a_p = a_w + a_e \quad (\text{B.36})$$

$$b_p = -\frac{(C^2 e^{x_p C})}{(e^C - 1)} \Delta x_p \quad (\text{B.37})$$

- para os volumes de controle entre $P = 3$ a $P = N - 2$ são empregadas as Eqs. (B.9), (B.10), (B.11) e (B.12).
- para o volume de controle $P = N - 1$:

$$a_w = \frac{1}{\Delta x} \quad (\text{B.38})$$

$$a_e = \frac{2}{\Delta x} \quad (\text{B.39})$$

$$a_p = a_w + a_e \quad (\text{B.40})$$

$$b_p = -\frac{(C^2 e^{x_p C})}{(e^C - 1)} \Delta x_p \quad (\text{B.41})$$

- para o volume de controle $P = N$ são empregadas as Eqs. (B.30), (B.31), (B.32) e (B.33).

EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO

A equação de advecção-difusão é dada pela Eq. (B.42). Os coeficientes e termos fontes foram obtidos com as quatro formas de aplicar as condições de contorno: sem volume fictício, com volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero.

$$Pe \frac{d\phi}{dx} = \frac{d^2\phi}{dx^2} \quad (\text{B.42})$$

Condições de Contorno Aplicadas Sem Volume Fictício

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício são dados por:

- para o volume de controle $P = 1$:

$$a_w = 0 \quad (\text{B.43})$$

$$a_e = \frac{1}{\Delta x} - \frac{Pe}{2} \quad (\text{B.44})$$

$$a_p = \frac{Pe}{2} + \frac{3}{\Delta x} \quad (\text{B.45})$$

$$b_p = \left(Pe + \frac{2}{\Delta x} \right) \phi_a \quad (\text{B.46})$$

- para os volumes de controle entre $P = 2$ a $P = N - 1$:

$$a_w = \frac{1}{\Delta x} + \frac{Pe}{2} \quad (\text{B.47})$$

$$a_e = \frac{1}{\Delta x} - \frac{Pe}{2} \quad (\text{B.48})$$

$$a_p = a_w + a_e \quad (\text{B.49})$$

$$b_p = 0 \quad (\text{B.50})$$

- para o volume de controle $P = N$:

$$a_w = \frac{1}{\Delta x} + \frac{Pe}{2} \quad (\text{B.51})$$

$$a_e = 0 \quad (\text{B.52})$$

$$a_p = \frac{3}{\Delta x} - \frac{Pe}{2} \quad (\text{B.53})$$

$$b_p = \left(\frac{2}{\Delta x} - Pe \right) \phi_b \quad (\text{B.54})$$

Condições de Contorno Aplicadas Com Volume Fictício

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício são dados por:

- para o volume de controle $P = 0$ são empregadas as Eqs. (B.17), (B.18), (B.19) e (B.20).
- para os volumes de controle entre $P = 1$ a $P = N$ são empregadas as Eqs. (B.47), (B.48), (B.49) e (B.50).
- para o volume de controle $P = N + 1$ são empregadas as Eqs. (B.22), (B.23), (B.24) e (B.25).

Condições de Contorno Aplicadas Com Meio-Volume

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume são dados por:

- para o volume de controle $P = 1$ são empregadas as Eqs. (B.26), (B.27), (B.28) e (B.29).
- para os volumes de controle entre $P = 2$ a $P = N - 1$ são empregadas as Eqs. (B.47), (B.48), (B.49) e (B.50).
- para o volume de controle $P = N$ são empregadas as Eqs. (B.30), (B.31), (B.32) e (B.33).

Condições de Contorno Aplicadas Com Volume de Espessura Zero

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero são dados por:

- para o volume de controle $P = 1$ são empregadas as Eqs. (B.26), (B.27), (B.28) e (B.29).
- para o volume de controle $P = 2$:

$$a_w = Pe + \frac{2}{\Delta x} \quad (B.55)$$

$$a_e = \frac{1}{\Delta x} - \frac{Pe}{2} \quad (B.56)$$

$$a_p = \frac{3}{\Delta x} + \frac{Pe}{2} \quad (B.57)$$

$$b_p = 0 \quad (B.58)$$

- para os volumes de controle entre $P = 3$ a $P = N - 2$ são empregadas as Eqs. (B.47), (B.48), (B.49) e (B.50).
- para o volume de controle $P = N - 1$:

$$a_w = \frac{1}{\Delta x} + \frac{Pe}{2} \quad (B.59)$$

$$a_e = \frac{2}{\Delta x} - Pe \quad (B.60)$$

$$a_p = \frac{3}{\Delta x} - \frac{Pe}{2} \quad (B.61)$$

$$b_p = 0 \quad (B.62)$$

- para o volume de controle $P = N$ são empregadas as Eqs. (B.30), (B.31), (B.32) e (B.33).

EQUAÇÃO DE BURGERS

A equação de Burgers é dada pela Eq. (B.63) e seu termo fonte (S) pela Eq. (B.64). Os coeficientes e termos fontes foram obtidos com as quatro formas de aplicar as condições de contorno: sem volume fictício, com volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero. O termo fonte (S) foi integrado pela regra do retângulo, numericamente é dado pela Eq. (B.65).

$$\text{Re} \frac{d\phi^2}{dx} = \frac{d^2\phi}{dx^2} + S \quad (\text{B.63})$$

$$S = \text{Re}^2 e^{x \text{Re}} \frac{(2e^{x \text{Re}} - e^{\text{Re}} - 1)}{(e^{\text{Re}} - 1)^2} \quad (\text{B.64})$$

$$S_p = \text{Re}^2 e^{x_p \text{Re}} \frac{(2e^{x_p \text{Re}} - e^{\text{Re}} - 1)}{(e^{\text{Re}} - 1)^2} \quad (\text{B.65})$$

Condições de Contorno Aplicadas Sem Volume Fictício

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício são dados por:

- para o volume de controle $P = 1$:

$$a_w = 0 \quad (\text{B.66})$$

$$a_e = 2 \quad (\text{B.67})$$

$$a_p = 6 + \text{Re} \Delta x (\phi_p^* + \phi_E^*) \quad (\text{B.68})$$

$$b_p = 2S_p \Delta x^2 + 4\phi_a + \text{Re} \Delta x \left[2\phi_a^2 - \frac{\beta}{2} (\phi_E^{*2} - \phi_p^{*2}) \right] \quad (\text{B.69})$$

onde o símbolo * representa os valores explícitos da iteração anterior.

- para os volumes de controle entre $P = 2$ a $P = N - 1$:

$$a_w = 2 + \text{Re} \Delta x (\phi_w^* + \phi_p^*) \quad (\text{B.70})$$

$$a_e = 2 \quad (\text{B.71})$$

$$a_p = 4 + \text{Re} \Delta x (\phi_p^* + \phi_e^*) \quad (\text{B.72})$$

$$b_p = 2S_p \Delta x^2 + \text{Re} \Delta x \frac{\beta}{2} (2\phi_p^{*2} - \phi_w^{*2} - \phi_e^{*2}) \quad (\text{B.73})$$

- para o volume de controle $P = N$:

$$a_w = 2 + \text{Re} \Delta x (\phi_w^* + \phi_p^*) \quad (\text{B.74})$$

$$a_e = 0 \quad (\text{B.75})$$

$$a_p = 6 + 2 \text{Re} \Delta x \phi_b^* \quad (\text{B.76})$$

$$b_p = 2S_p \Delta x^2 + 4\phi_b - \text{Re} \Delta x \left[2\phi_b^* \beta (\phi_b^* - \phi_p^*) - \frac{\beta}{2} (\phi_p^{*2} - \phi_w^{*2}) \right] \quad (\text{B.77})$$

Condições de Contorno Aplicadas Com Volume Fictício

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício são dados por:

- para o volume de controle $P = 0$ são empregadas as Eqs. (B.17), (B.18), (B.19) e (B.20).
- para os volumes de controle entre $P = 1$ a $P = N$ são empregadas as Eqs. (B.70), (B.71), (B.72) e (B.73).
- para o volume de controle $P = N + 1$ são empregadas as Eqs. (B.22), (B.23), (B.24) e (B.25).

Condições de Contorno Aplicadas Com Meio-Volume

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume são dados por:

- para o volume de controle $P = 1$ são empregadas as Eqs. (B.26), (B.27), (B.28) e (B.29).

- para os volumes de controle entre $P = 2$ a $P = N - 1$ são empregadas as Eqs. (B.70), (B.71), (B.72) e (B.73).
- para o volume de controle $P = N$ são empregadas as Eqs. (B.30), (B.31), (B.32) e (B.33).

Condições de Contorno Aplicadas Com Volume de Espessura Zero

Os coeficientes e termos fontes para a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero são dados por:

- para o volume de controle $P = 1$ são empregadas as Eqs. (B.26), (B.27), (B.28) e (B.29).
- para o volume de controle $P = 2$:

$$a_w = 4 + 2 \operatorname{Re} \Delta x \phi_w^* \quad (\text{B.78})$$

$$a_e = 2 \quad (\text{B.79})$$

$$a_p = 6 + \operatorname{Re} \Delta x (\phi_E^* + \phi_p^*) \quad (\text{B.80})$$

$$b_p = 2S_p \Delta x^2 - \operatorname{Re} \Delta x \frac{\beta}{2} (\phi_E^{*2} - \phi_p^{*2}) \quad (\text{B.81})$$

- para os volumes de controle entre $P = 3$ a $P = N - 2$ são empregadas as Eqs. (B.70), (B.71), (B.72) e (B.73).
- para o volume de controle $P = N - 1$:

$$a_w = 2 + \operatorname{Re} \Delta x (\phi_p^* + \phi_w^*) \quad (\text{B.82})$$

$$a_e = 4 \quad (\text{B.83})$$

$$a_p = 6 + 2 \operatorname{Re} \Delta x \phi_E^* \quad (\text{B.84})$$

$$b_p = 2S_p \Delta x^2 + \operatorname{Re} \Delta x \frac{\beta}{2} (\phi_p^{*2} - \phi_w^{*2}) - 2 \operatorname{Re} \Delta x \beta (\phi_E^{*2} - \phi_E^* \phi_p^*) \quad (\text{B.85})$$

- para o volume de controle $P = N$ são empregadas as Eqs. (B.30), (B.31), (B.32) e (B.33).

APÊNDICE C. Identificação das simulações computacionais

Este apêndice identifica as simulações computacionais das equações governantes por meio de tabelas. Em cada tabela contém o nome da simulação, o número de volumes de controle, memória computacional utilizada para executar a simulação, o número de iterações externas para o problema não-linear (equação de Burgers), o valor da métrica (Δx) que representa cada malha computacional e o tempo de processamento calculado por:

$$CPU = t2 - t1 \quad (C.1)$$

onde $t1$ indica o tempo inicial e $t2$ indica o tempo final do processamento de cálculo.

EQUAÇÃO DE POISSON

As informações que identificam as simulações para a equação de Poisson com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício foram divididas em quatro tabelas. Para o termo fonte integrado analiticamente as informações estão nas Tabs. C.1 e C.2 e para o termo fonte integrado pela regra do retângulo as informações estão nas Tabs. C.3 e C.4.

Tabela C.1: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado analiticamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Poisson_1Dp_1p0_001_vc	1	1	---	0,00	RAM = 385 MB
Poisson_1Dp_1p0_002_vc	3	0,33333	---	0,00	RAM = 385 MB
Poisson_1Dp_1p0_003_vc	9	0,11111	---	0,00	RAM = 385 MB
Poisson_1Dp_1p0_004_vc	27	0,03704	---	0,00	RAM = 385 MB
Poisson_1Dp_1p0_005_vc	81	0,01235	---	0,00	RAM = 394 MB
Poisson_1Dp_1p0_006_vc	243	0,00412	---	0,00	RAM = 402 MB
Poisson_1Dp_1p0_007_vc	729	0,00137	---	0,00	RAM = 402 MB
Poisson_1Dp_1p0_008_vc	2.187	4,57247E-4	---	0,00	RAM = 403 MB
Poisson_1Dp_1p0_009_vc	6.561	1,52416E-4	---	0,01	RAM = 394 MB
Poisson_1Dp_1p0_010_vc	19.683	5,08053E-5	---	0,04	RAM = 400 MB
Poisson_1Dp_1p0_011_vc	59.049	1,69351E-5	---	0,11	RAM = 396 MB
Poisson_1Dp_1p0_012_vc	177.147	5,64503E-6	---	0,31	RAM = 404 MB
Poisson_1Dp_1p0_013_vc	531.441	1,88168E-6	---	1,42	RAM = 447 MB
Poisson_1Dp_1p0_014_vc	1.594.323	6,27225E-7	---	3,62	RAM = 593 MB
Poisson_1Dp_1p0_015_vc	4.782.969	2,09075E-7	---	12,98	RAM = 837 MB
Poisson_1Dp_1p0_016_vc	14.348.907	6,96917E-8	---	33,98	RAM = 1,65 GB
Poisson_1Dp_1p0_017_vc	43.046.721	2,32306E-8	---	105,12	RAM = 4,24 GB 1 m e 45 s
Poisson_1Dp_1p0_018_vc	129.140.163	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.2: Identificação das simulações para volumes pares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado analiticamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Poisson_1Dp_1p0_001_ma	2	0,5	---	0,00	RAM = 402 MB
Poisson_1Dp_1p0_002_ma	4	0,25	---	0,00	RAM = 408 MB
Poisson_1Dp_1p0_003_ma	8	0,125	---	0,00	RAM = 402 MB
Poisson_1Dp_1p0_004_ma	16	0,0625	---	0,00	RAM = 402 MB
Poisson_1Dp_1p0_005_ma	32	0,03125	---	0,00	RAM = 408 MB
Poisson_1Dp_1p0_006_ma	64	0,01563	---	0,00	RAM = 412 MB
Poisson_1Dp_1p0_007_ma	128	0,00781	---	0,00	RAM = 419 MB
Poisson_1Dp_1p0_008_ma	256	0,00391	---	0,00	RAM = 419 MB
Poisson_1Dp_1p0_009_ma	512	0,00195	---	0,00	RAM = 419 MB
Poisson_1Dp_1p0_010_ma	1.024	9,76563E-4	---	0,00	RAM = 419 MB
Poisson_1Dp_1p0_011_ma	2.048	4,88281E-4	---	0,00	RAM = 423 MB
Poisson_1Dp_1p0_012_ma	4.096	2,44141E-4	---	0,00	RAM = 423 MB
Poisson_1Dp_1p0_013_ma	8.192	1,2207E-4	---	0,01	RAM = 427 MB
Poisson_1Dp_1p0_014_ma	16.384	6,10352E-5	---	0,03	RAM = 429 MB
Poisson_1Dp_1p0_015_ma	32.768	3,05176E-5	---	0,06	RAM = 425 MB
Poisson_1Dp_1p0_016_ma	65.536	1,52588E-5	---	0,12	RAM = 429 MB
Poisson_1Dp_1p0_017_ma	131.072	7,62939E-6	---	0,25	RAM = 434 MB
Poisson_1Dp_1p0_018_ma	262.144	3,8147E-6	---	0,51	RAM = 447 MB
Poisson_1Dp_1p0_019_ma	524.288	1,90735E-6	---	1,04	RAM = 471 MB
Poisson_1Dp_1p0_020_ma	1.048.576	9,53674E-7	---	2,01	RAM = 524 MB
Poisson_1Dp_1p0_021_ma	2.097.152	4,76837E-7	---	4,01	RAM = 617 MB
Poisson_1Dp_1p0_022_ma	4.194.304	2,38419E-7	---	8,21	RAM = 840 MB
Poisson_1Dp_1p0_023_ma	8.388.608	1,19209E-7	---	16,56	RAM = 1,14 GB
Poisson_1Dp_1p0_024_ma	16.777.216	5,96046E-8	---	32,75	RAM = 1,89 GB
Poisson_1Dp_1p0_025_ma	33.554.432	2,98023E-8	---	67,02	RAM = 3,47 GB 1 m e 07 s
Poisson_1Dp_1p0_026_ma	67.108.864	1,49012E-8	---	135,51	RAM = 8,89 GB 2 m e 15 s
Poisson_1Dp_1p0_027_ma	134.217.728	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.3: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado numericamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Poisson_1Dp_2p0_001_vc	1	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Poisson_1Dp_2p0_002_vc	3	0,33333	---	0,00	RAM = 484 MB
Poisson_1Dp_2p0_003_vc	9	0,11111	---	0,00	RAM = 482 MB
Poisson_1Dp_2p0_004_vc	27	0,03704	---	0,00	RAM = 483 MB
Poisson_1Dp_2p0_005_vc	81	0,01235	---	0,00	RAM = 483 MB
Poisson_1Dp_2p0_006_vc	243	0,00412	---	0,00	RAM = 483 MB
Poisson_1Dp_2p0_007_vc	729	0,00137	---	0,00	RAM = 483 MB
Poisson_1Dp_2p0_008_vc	2.187	4,57247E-4	---	0,00	RAM = 483 MB
Poisson_1Dp_2p0_009_vc	6.561	1,52416E-4	---	0,01	RAM = 485 MB
Poisson_1Dp_2p0_010_vc	19.683	5,08053E-5	---	0,04	RAM = 484 MB
Poisson_1Dp_2p0_011_vc	59.049	1,69351E-5	---	0,14	RAM = 483 MB
Poisson_1Dp_2p0_012_vc	177.147	5,64503E-6	---	0,41	RAM = 501 MB
Poisson_1Dp_2p0_013_vc	531.441	1,88168E-6	---	1,23	RAM = 542 MB
Poisson_1Dp_2p0_014_vc	1.594.323	6,27225E-7	---	3,64	RAM = 630 MB
Poisson_1Dp_2p0_015_vc	4.782.969	2,09075E-7	---	10,98	RAM = 918 MB
Poisson_1Dp_2p0_016_vc	14.348.907	6,96917E-8	---	32,98	RAM = 1,75 GB
Poisson_1Dp_2p0_017_vc	43.046.721	2,32306E-8	---	101,17	RAM = 4,34 GB 1 m e 41 s
Poisson_1Dp_2p0_018_vc	129.140.163	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.4: Identificação das simulações para volumes pares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado numericamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Poisson_1Dp_2p0_001_ma	2	0,5	---	0,00	RAM = 482 MB
Poisson_1Dp_2p0_002_ma	4	0,25	---	0,00	RAM = 487 MB
Poisson_1Dp_2p0_003_ma	8	0,125	---	0,00	RAM = 486 MB
Poisson_1Dp_2p0_004_ma	16	0,0625	---	0,00	RAM = 486 MB
Poisson_1Dp_2p0_005_ma	32	0,03125	---	0,00	RAM = 488 MB
Poisson_1Dp_2p0_006_ma	64	0,01563	---	0,00	RAM = 482 MB
Poisson_1Dp_2p0_007_ma	128	0,00781	---	0,00	RAM = 482 MB
Poisson_1Dp_2p0_008_ma	256	0,00391	---	0,00	RAM = 482 MB
Poisson_1Dp_2p0_009_ma	512	0,00195	---	0,00	RAM = 482 MB
Poisson_1Dp_2p0_010_ma	1.024	9,76563E-4	---	0,00	RAM = 482 MB
Poisson_1Dp_2p0_011_ma	2.048	4,88281E-4	---	0,00	RAM = 483 MB
Poisson_1Dp_2p0_012_ma	4.096	2,44141E-4	---	0,00	RAM = 483 MB
Poisson_1Dp_2p0_013_ma	8.192	1,2207E-4	---	0,01	RAM = 482 MB
Poisson_1Dp_2p0_014_ma	16.384	6,10352E-5	---	0,03	RAM = 482 MB
Poisson_1Dp_2p0_015_ma	32.768	3,05176E-5	---	0,06	RAM = 486 MB
Poisson_1Dp_2p0_016_ma	65.536	1,52588E-5	---	0,12	RAM = 489 MB
Poisson_1Dp_2p0_017_ma	131.072	7,62939E-6	---	0,25	RAM = 495 MB
Poisson_1Dp_2p0_018_ma	262.144	3,8147E-6	---	0,51	RAM = 506 MB
Poisson_1Dp_2p0_019_ma	524.288	1,90735E-6	---	1,01	RAM = 532 MB
Poisson_1Dp_2p0_020_ma	1.048.576	9,53674E-7	---	2,04	RAM = 580 MB
Poisson_1Dp_2p0_021_ma	2.097.152	4,76837E-7	---	4,07	RAM = 670 MB
Poisson_1Dp_2p0_022_ma	4.194.304	2,38419E-7	---	8,15	RAM = 862 MB
Poisson_1Dp_2p0_023_ma	8.388.608	1,19209E-7	---	16,50	RAM = 1,21 GB
Poisson_1Dp_2p0_024_ma	16.777.216	5,96046E-8	---	32,60	RAM = 1,97 GB
Poisson_1Dp_2p0_025_ma	33.554.432	2,98023E-8	---	66,32	RAM = 3,47 GB 1 m e 06 s
Poisson_1Dp_2p0_026_ma	67.108.864	1,49012E-8	---	133,51	RAM = 8,89 GB 2 m e 13 s
Poisson_1Dp_2p0_027_ma	134.217.728	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.5: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício e termo fonte integrado numericamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Poisson_1Dp_3p0_001_vc	1	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Poisson_1Dp_3p0_001_vc	3	0,33333	---	0,00	RAM = 465 MB
Poisson_1Dp_3p0_002_vc	9	0,11111	---	0,00	RAM = 460 MB
Poisson_1Dp_3p0_003_vc	27	0,03704	---	0,00	RAM = 463 MB
Poisson_1Dp_3p0_004_vc	81	0,01235	---	0,00	RAM = 464 MB
Poisson_1Dp_3p0_005_vc	243	0,00412	---	0,00	RAM = 463 MB
Poisson_1Dp_3p0_006_vc	729	0,00137	---	0,00	RAM = 463 MB
Poisson_1Dp_3p0_007_vc	2.187	4,57247E-4	---	0,00	RAM = 460 MB
Poisson_1Dp_3p0_008_vc	6.561	1,52416E-4	---	0,01	RAM = 461 MB
Poisson_1Dp_3p0_009_vc	19.683	5,08053E-5	---	0,04	RAM = 460 MB
Poisson_1Dp_3p0_010_vc	59.049	1,69351E-5	---	0,14	RAM = 463 MB
Poisson_1Dp_3p0_011_vc	177.147	5,64503E-6	---	0,40	RAM = 476 MB
Poisson_1Dp_3p0_012_vc	531.441	1,88168E-6	---	1,20	RAM = 502 MB
Poisson_1Dp_3p0_013_vc	1.594.323	6,27225E-7	---	3,62	RAM = 649 MB
Poisson_1Dp_3p0_014_vc	4.782.969	2,09075E-7	---	10,95	RAM = 893 MB
Poisson_1Dp_3p0_015_vc	14.348.907	6,96917E-8	---	32,81	RAM = 1,72 GB
Poisson_1Dp_3p0_016_vc	43.046.721	2,32306E-8	---	99,03	RAM = 4,34 GB 1 m e 39 s
Poisson_1Dp_3p0_017_vc	129.140.163	---	---	---	RAM = excede a memória

Para a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício, os dados das simulações constam nas Tabs. C.5 e C.6, que trazem as simulações com a utilização de

volumes ímpares e pares, respectivamente. O termo fonte empregado para esta formulação, assim como para as formas de aplicar as condições de contorno com meio-volume e com volume de espessura zero, foi integrado pela regra do retângulo.

Tabela C.6: Identificação das simulações para volumes pares com a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício e termo fonte integrado numericamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Poisson_1Dp_3p0_001_ma	2	0,5	---	0,00	RAM = 456 MB
Poisson_1Dp_3p0_002_ma	4	0,25	---	0,00	RAM = 456 MB
Poisson_1Dp_3p0_003_ma	8	0,125	---	0,00	RAM = 476 MB
Poisson_1Dp_3p0_004_ma	16	0,0625	---	0,00	RAM = 476 MB
Poisson_1Dp_3p0_005_ma	32	0,03125	---	0,00	RAM = 457 MB
Poisson_1Dp_3p0_006_ma	64	0,01563	---	0,00	RAM = 472 MB
Poisson_1Dp_3p0_007_ma	128	0,00781	---	0,00	RAM = 457 MB
Poisson_1Dp_3p0_008_ma	256	0,00391	---	0,00	RAM = 452 MB
Poisson_1Dp_3p0_009_ma	512	0,00195	---	0,00	RAM = 457 MB
Poisson_1Dp_3p0_010_ma	1.024	9,76563E-4	---	0,00	RAM = 452 MB
Poisson_1Dp_3p0_011_ma	2.048	4,88281E-4	---	0,00	RAM = 459 MB
Poisson_1Dp_3p0_012_ma	4.096	2,44141E-4	---	0,00	RAM = 459 MB
Poisson_1Dp_3p0_013_ma	8.192	1,2207E-4	---	0,01	RAM = 462 MB
Poisson_1Dp_3p0_014_ma	16.384	6,10352E-5	---	0,03	RAM = 461 MB
Poisson_1Dp_3p0_015_ma	32.768	3,05176E-5	---	0,06	RAM = 456 MB
Poisson_1Dp_3p0_016_ma	65.536	1,52588E-5	---	0,14	RAM = 465 MB
Poisson_1Dp_3p0_017_ma	131.072	7,62939E-6	---	0,25	RAM = 475 MB
Poisson_1Dp_3p0_018_ma	262.144	3,8147E-6	---	0,51	RAM = 476 MB
Poisson_1Dp_3p0_019_ma	524.288	1,90735E-6	---	1,07	RAM = 512 MB
Poisson_1Dp_3p0_020_ma	1.048.576	9,53674E-7	---	2,04	RAM = 580 MB
Poisson_1Dp_3p0_021_ma	2.097.152	4,76837E-7	---	4,10	RAM = 646 MB
Poisson_1Dp_3p0_022_ma	4.194.304	2,38419E-7	---	8,20	RAM = 842 MB
Poisson_1Dp_3p0_023_ma	8.388.608	1,19209E-7	---	16,64	RAM = 1,21 GB
Poisson_1Dp_3p0_024_ma	16.777.216	5,96046E-8	---	33,62	RAM = 1,97 GB
Poisson_1Dp_3p0_025_ma	33.554.432	2,98023E-8	---	65,59	RAM = 3,47 GB 1 m e 06 s
Poisson_1Dp_3p0_026_ma	67.108.864	1,49012E-8	---	132,12	RAM = 8,89 GB 2 m e 12 s
Poisson_1Dp_3p0_027_ma	134.217.728	---	---	---	RAM = excede a memória

Para a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume, os dados das simulações constam nas Tabs. C.7 e C.8, que trazem as simulações com a utilização de volumes ímpares e pares, respectivamente.

Para a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero, os dados das simulações constam nas Tabs. C.9 e C.10, que trazem as simulações com a utilização de volumes ímpares e pares, respectivamente.

Tabela C.7: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume e termo fonte integrado numericamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Poisson_1Dp_4p0_v2_001_vc	1	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Poisson_1Dp_4p0_v2_001_vc	3	0,5	---	0,00	RAM = 475 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_002_vc	5	0,25	---	0,00	RAM = 479 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_003_vc	9	0,125	---	0,00	RAM = 475 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_004_vc	17	0,0625	---	0,00	RAM = 475 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_005_vc	33	0,03125	---	0,00	RAM = 484 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_006_vc	65	0,01563	---	0,00	RAM = 477 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_007_vc	129	0,00781	---	0,00	RAM = 485 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_008_vc	257	0,00391	---	0,00	RAM = 484 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_009_vc	513	0,00195	---	0,00	RAM = 485 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_010_vc	1.025	9,76563E-4	---	0,00	RAM = 482 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_011_vc	2.049	4,88281E-4	---	0,00	RAM = 488 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_012_vc	4.097	2,44141E-4	---	0,00	RAM = 487 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_013_vc	8.193	1,2207E-4	---	0,01	RAM = 477 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_014_vc	16.385	6,10352E-5	---	0,03	RAM = 491 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_015_vc	32.769	3,05176E-5	---	0,06	RAM = 485 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_016_vc	65.537	1,52588E-5	---	0,14	RAM = 476 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_017_vc	131.073	7,62939E-6	---	0,26	RAM = 497 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_018_vc	262.145	3,8147E-6	---	0,54	RAM = 512 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_019_vc	524.289	1,90735E-6	---	1,10	RAM = 534 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_020_vc	1.048.577	9,53674E-7	---	2,20	RAM = 604 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_021_vc	2.097.153	4,76837E-7	---	4,42	RAM = 674 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_022_vc	4.194.305	2,38419E-7	---	8,85	RAM = 994 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_023_vc	8.388.609	1,19209E-7	---	17,70	RAM = 1,47 GB
Poisson_1Dp_4p0_v2_024_vc	16.777.217	5,96046E-8	---	35,42	RAM = 2,47 GB
Poisson_1Dp_4p0_v2_025_vc	33.554.433	2,98023E-8	---	70,78	RAM = 4,48 GB 1 m e 10 s
Poisson_1Dp_4p0_v2_026_vc	67.108.865	1,49012E-8	---	128,85	RAM = 8,57 GB 2 m e 08 s
Poisson_1Dp_4p0_v2_027_vc	134.217.729	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.8: Identificação das simulações para volumes pares com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume e termo fonte integrado numericamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Poisson_1Dp_4p0_v2_001_ma	2	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Poisson_1Dp_4p0_v2_001_ma	4	0,33333	---	0,00	RAM = 473 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_002_ma	10	0,11111	---	0,00	RAM = 476 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_003_ma	28	0,03704	---	0,00	RAM = 478 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_004_ma	82	0,01235	---	0,00	RAM = 474 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_005_ma	244	0,00412	---	0,00	RAM = 472 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_006_ma	730	0,00137	---	0,00	RAM = 479 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_007_ma	2.188	4,57247E-4	---	0,00	RAM = 476 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_008_ma	6.562	1,52416E-4	---	0,01	RAM = 469 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_009_ma	19.684	5,08053E-5	---	0,04	RAM = 478 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_010_ma	59.050	1,69351E-5	---	0,14	RAM = 489 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_011_ma	177.148	5,64503E-6	---	0,43	RAM = 493 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_012_ma	531.442	1,88168E-6	---	1,31	RAM = 521 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_013_ma	1.594.324	6,27225E-7	---	3,93	RAM = 668 MB
Poisson_1Dp_4p0_v2_014_ma	4.782.970	2,09075E-7	---	11,95	RAM = 1,03 GB
Poisson_1Dp_4p0_v2_015_ma	14.348.908	6,96917E-8	---	35,76	RAM = 2,17 GB
Poisson_1Dp_4p0_v2_016_ma	43.046.722	2,32306E-8	---	106,56	RAM = 5,60 GB 1 m e 46 s
Poisson_1Dp_4p0_v2_017_ma	129.140.164	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.9: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma com volume de espessura zero e termo fonte integrado numericamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Poisson_1Dp_5p0_v2_001_vc	1	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Poisson_1Dp_5p0_v2_001_vc	5	0,33333	---	0,00	RAM = 465 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_002_vc	11	0,11111	---	0,00	RAM = 464 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_003_vc	29	0,03704	---	0,00	RAM = 466 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_004_vc	83	0,01235	---	0,00	RAM = 457 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_005_vc	245	0,00412	---	0,00	RAM = 457 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_006_vc	731	0,00137	---	0,00	RAM = 467 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_007_vc	2.189	4,57247E-4	---	0,00	RAM = 456 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_008_vc	6.563	1,52416E-4	---	0,01	RAM = 468 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_009_vc	19.685	5,08053E-5	---	0,04	RAM = 459 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_010_vc	59.051	1,69351E-5	---	0,14	RAM = 473 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_011_vc	177.149	5,64503E-6	---	0,43	RAM = 483 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_012_vc	531.443	1,88168E-6	---	1,34	RAM = 517 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_013_vc	1.594.325	6,27225E-7	---	4,03	RAM = 659 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_014_vc	4.782.971	2,09075E-7	---	12,17	RAM = 1,02 GB
Poisson_1Dp_5p0_v2_015_vc	14.348.909	6,96917E-8	---	36,45	RAM = 2,15 GB
Poisson_1Dp_5p0_v2_016_vc	43.046.723	2,32306E-8	---	108,65	RAM = 5,51 GB 1 m e 48 s
Poisson_1Dp_5p0_v2_017_vc	129.140.165	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.10: Identificação das simulações para volumes pares com a forma com volume de espessura zero e termo fonte integrado numericamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Poisson_1Dp_5p0_v2_001_ma	2	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Poisson_1Dp_5p0_v2_001_ma	6	0,25	---	0,00	RAM = 462 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_002_ma	10	0,125	---	0,00	RAM = 465 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_003_ma	18	0,0625	---	0,00	RAM = 464 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_004_ma	34	0,03125	---	0,00	RAM = 465 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_005_ma	66	0,01563	---	0,00	RAM = 465 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_006_ma	130	0,00781	---	0,00	RAM = 461 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_007_ma	258	0,00391	---	0,00	RAM = 465 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_008_ma	514	0,00195	---	0,00	RAM = 469 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_009_ma	1.026	9,76563E-4	---	0,00	RAM = 465 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_010_ma	2.050	4,88281E-4	---	0,00	RAM = 472 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_011_ma	4.098	2,44141E-4	---	0,00	RAM = 471 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_012_ma	8.194	1,2207E-4	---	0,01	RAM = 471 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_013_ma	16.386	6,10352E-5	---	0,03	RAM = 463 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_014_ma	32.770	3,05176E-5	---	0,06	RAM = 459 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_015_ma	65.538	1,52588E-5	---	0,14	RAM = 475 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_016_ma	131.074	7,62939E-6	---	0,28	RAM = 480 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_017_ma	262.146	3,8147E-6	---	0,56	RAM = 487 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_018_ma	524.290	1,90735E-6	---	1,12	RAM = 516 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_019_ma	1.048.578	9,53674E-7	---	2,26	RAM = 591 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_020_ma	2.097.154	4,76837E-7	---	4,53	RAM = 720 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_021_ma	4.194.306	2,38419E-7	---	9,06	RAM = 977 MB
Poisson_1Dp_5p0_v2_022_ma	8.388.610	1,19209E-7	---	18,12	RAM = 1,41 GB
Poisson_1Dp_5p0_v2_023_ma	16.777.218	5,96046E-8	---	36,28	RAM = 2,45 GB
Poisson_1Dp_5p0_v2_024_ma	33.554.434	2,98023E-8	---	72,51	RAM = 4,47 GB 1 m e 12 s
Poisson_1Dp_5p0_v2_025_ma	67.108.866	1,49012E-8	---	131,64	RAM = 8,57 GB 2 m e 11 s
Poisson_1Dp_5p0_v2_026_ma	134.217.730	---	---	---	RAM = excede a memória

EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO

As informações que identificam as simulações para a equação de advecção-difusão com as formas de aplicar as condições de contorno com volume fictício, sem volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero foram obtidas empregando volumes ímpares e constam nas Tabs. C.11, C.12, C.13 e C.14, respectivamente.

Tabela C.11: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Adv_Dif_1Dp_1p0_001_vc	1	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Adv_Dif_1Dp_1p0_001_vc	3	0,33333	---	0,00	RAM = 439 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_002_vc	9	0,11111	---	0,00	RAM = 440 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_003_vc	27	0,03704	---	0,00	RAM = 457 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_004_vc	81	0,01235	---	0,00	RAM = 453 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_005_vc	243	0,00412	---	0,00	RAM = 453 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_006_vc	729	0,00137	---	0,00	RAM = 453 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_007_vc	2.187	4,57247E-4	---	0,00	RAM = 443 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_008_vc	6.561	1,52416E-4	---	0,00	RAM = 455 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_009_vc	19.683	5,08053E-5	---	0,03	RAM = 454 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_010_vc	59.049	1,69351E-5	---	0,09	RAM = 453 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_011_vc	177.147	5,64503E-6	---	0,28	RAM = 468 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_012_vc	531.441	1,88168E-6	---	0,82	RAM = 500 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_013_vc	1.594.323	6,27225E-7	---	2,53	RAM = 593 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_014_vc	4.782.969	2,09075E-7	---	7,65	RAM = 885 MB
Adv_Dif_1Dp_1p0_015_vc	14.348.907	6,96917E-8	---	22,70	RAM = 1,75 GB
Adv_Dif_1Dp_1p0_016_vc	43.046.721	2,32306E-8	---	67,10	RAM = 4,34 GB 1 m e 07 s
Adv_Dif_1Dp_1p0_017_vc	129.140.163	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.12: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Adv_Dif_1Dp_2p0_001_vc	1	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Adv_Dif_1Dp_2p0_001_vc	3	0,33333	---	0,00	RAM = 525 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_002_vc	9	0,11111	---	0,00	RAM = 525 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_003_vc	27	0,03704	---	0,00	RAM = 524 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_004_vc	81	0,01235	---	0,00	RAM = 524 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_005_vc	243	0,00412	---	0,00	RAM = 522 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_006_vc	729	0,00137	---	0,00	RAM = 521 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_007_vc	2.187	4,57247E-4	---	0,00	RAM = 523 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_008_vc	6.561	1,52416E-4	---	0,00	RAM = 522 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_009_vc	19.683	5,08053E-5	---	0,03	RAM = 513 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_010_vc	59.049	1,69351E-5	---	0,09	RAM = 516 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_011_vc	177.147	5,64503E-6	---	0,26	RAM = 516 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_012_vc	531.441	1,88168E-6	---	0,82	RAM = 561 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_013_vc	1.594.323	6,27225E-7	---	2,51	RAM = 658 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_014_vc	4.782.969	2,09075E-7	---	7,78	RAM = 952 MB
Adv_Dif_1Dp_2p0_015_vc	14.348.907	6,96917E-8	---	22,93	RAM = 1,78 GB
Adv_Dif_1Dp_2p0_016_vc	43.046.721	2,32306E-8	---	67,70	RAM = 4,36 GB 1 m e 07 s
Adv_Dif_1Dp_2p0_017_vc	129.140.163	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.13: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_001_vc	1	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_001_vc	3	0,5	---	0,00	RAM = 528 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_002_vc	5	0,25	---	0,00	RAM = 533 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_003_vc	9	0,125	---	0,00	RAM = 532 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_004_vc	17	0,0625	---	0,00	RAM = 525 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_005_vc	33	0,03125	---	0,00	RAM = 521 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_006_vc	65	0,01563	---	0,00	RAM = 536 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_007_vc	129	0,00781	---	0,00	RAM = 535 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_008_vc	257	0,00391	---	0,00	RAM = 530 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_009_vc	513	0,00195	---	0,00	RAM = 535 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_010_vc	1.025	9,76563E-4	---	0,00	RAM = 527 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_011_vc	2.049	4,88281E-4	---	0,00	RAM = 534 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_012_vc	4.097	2,44141E-4	---	0,00	RAM = 535 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_013_vc	8.193	1,2207E-4	---	0,00	RAM = 537 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_014_vc	16.385	6,10352E-5	---	0,01	RAM = 534 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_015_vc	32.769	3,05176E-5	---	0,04	RAM = 526 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_016_vc	65.537	1,52588E-5	---	0,07	RAM = 537 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_017_vc	131.073	7,62939E-6	---	0,17	RAM = 532 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_018_vc	262.145	3,8147E-6	---	0,34	RAM = 562 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_019_vc	524.289	1,90735E-6	---	0,70	RAM = 586 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_020_vc	1.048.577	9,53674E-7	---	1,40	RAM = 664 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_021_vc	2.097.153	4,76837E-7	---	2,79	RAM = 724 MB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_022_vc	4.194.305	2,38419E-7	---	5,59	RAM = 1,01 GB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_023_vc	8.388.609	1,19209E-7	---	11,06	RAM = 1,57 GB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_024_vc	16.777.217	5,96046E-8	---	22,15	RAM = 2,58 GB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_025_vc	33.554.433	2,98023E-8	---	44,31	RAM = 4,57 GB
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_026_vc	67.108.865	1,49012E-8	---	80,04	RAM = 8,57 GB 1 m e 20 s
Adv_Dif_1Dp_3p0_v2_027_vc	134.217.729	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.14: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume de espessura zero

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_001_vc	1	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_001_vc	5	0,33333	---	0,00	RAM = 507 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_002_vc	11	0,11111	---	0,00	RAM = 515 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_003_vc	29	0,03704	---	0,00	RAM = 510 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_004_vc	83	0,01235	---	0,00	RAM = 518 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_005_vc	245	0,00412	---	0,00	RAM = 519 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_006_vc	731	0,00137	---	0,00	RAM = 518 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_007_vc	2.189	4,57247E-4	---	0,00	RAM = 517 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_008_vc	6.563	1,52416E-4	---	0,00	RAM = 518 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_009_vc	19.685	5,08053E-5	---	0,03	RAM = 519 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_010_vc	59.051	1,69351E-5	---	0,09	RAM = 523 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_011_vc	177.149	5,64503E-6	---	0,28	RAM = 534 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_012_vc	531.443	1,88168E-6	---	0,84	RAM = 565 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_013_vc	1.594.325	6,27225E-7	---	2,56	RAM = 708 MB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_014_vc	4.782.971	2,09075E-7	---	7,79	RAM = 1,07 GB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_015_vc	14.348.909	6,96917E-8	---	23,25	RAM = 2,21 GB
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_016_vc	43.046.723	2,32306E-8	---	68,84	RAM = 5,64 GB 1 m e 08 s
Adv_Dif_1Dp_4p0_v2_017_vc	129.140.165	---	---	---	RAM = excede a memória

EQUAÇÃO DE BURGERS

As informações que identificam as simulações para a equação de Burgers com as formas de aplicar as condições de contorno com volume fictício, sem volume fictício, com meio-volume e com volume de espessura zero foram obtidas empregando volumes ímpares e constam nas Tabs. C.15, C.16, C.17 e C.18, respectivamente.

Na coluna indicada por **itmax** mostra o número máximo de iterações utilizado pelo processamento do cálculo principal até atingir o erro de máquina. Para garantir a fidelidade da solução sem a propagação do erro de arredondamento foi empregado o dobro do número de iterações indicado na tabela. Conseqüentemente, o tempo desempenhado para o processamento da solução foi o dobro do indicado na coluna **tcpu**.

Tabela C.15: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado numericamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Burgers_1Dp_1p0_v2_001_vc	1	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Burgers_1Dp_1p0_v2_001_vc	3	0,33333	83	0,00	RAM = 470 MB
Burgers_1Dp_1p0_v2_002_vc	9	0,11111	52	0,00	RAM = 463 MB
Burgers_1Dp_1p0_v2_003_vc	27	0,03704	40	0,00	RAM = 470 MB
Burgers_1Dp_1p0_v2_004_vc	81	0,01235	39	0,00	RAM = 472 MB
Burgers_1Dp_1p0_v2_005_vc	243	0,00412	36	0,01	RAM = 463 MB
Burgers_1Dp_1p0_v2_006_vc	729	0,00137	32	0,06	RAM = 468 MB
Burgers_1Dp_1p0_v2_007_vc	2.187	4,57247E-4	30	0,18	RAM = 473 MB
Burgers_1Dp_1p0_v2_008_vc	6.561	1,52416E-4	29	0,54	RAM = 467 MB
Burgers_1Dp_1p0_v2_009_vc	19.683	5,08053E-5	27	1,48	RAM = 474 MB
Burgers_1Dp_1p0_v2_010_vc	59.049	1,69351E-5	25	4,53	RAM = 475 MB
Burgers_1Dp_1p0_v2_011_vc	177.147	5,64503E-6	23	11,40	RAM = 491 MB
Burgers_1Dp_1p0_v2_012_vc	531.441	1,88168E-6	20	31,40	RAM = 529 MB
Burgers_1Dp_1p0_v2_013_vc	1.594.323	6,27225E-7	20	89,70	RAM = 638 MB 1 m e 29 s
Burgers_1Dp_1p0_v2_014_vc	4.782.969	2,09075E-7	17	230,15	RAM = 1,12 GB 3 m e 50 s
Burgers_1Dp_1p0_v2_015_vc	14.348.907	6,96917E-8	17	730,51	RAM = 2,41 GB 12 m e 10 s
Burgers_1Dp_1p0_v2_016_vc	43.046.721	2,32306E-8	13	1607,23	RAM = 6,27 GB 26 m e 47 s
Burgers_1Dp_1p0_v2_017_vc	129.140.163	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.16: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno sem volume fictício e termo fonte integrado numericamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Burgers_1Dp_2p0_001_vc	1	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Burgers_1Dp_2p0_001_vc	3	0,33333	83	0,00	RAM = 528 MB
Burgers_1Dp_2p0_002_vc	9	0,11111	47	0,00	RAM = 527 MB
Burgers_1Dp_2p0_003_vc	27	0,03704	37	0,00	RAM = 524 MB
Burgers_1Dp_2p0_004_vc	81	0,01235	33	0,01	RAM = 512 MB
Burgers_1Dp_2p0_005_vc	243	0,00412	35	0,01	RAM = 513 MB
Burgers_1Dp_2p0_006_vc	729	0,00137	33	0,06	RAM = 518 MB
Burgers_1Dp_2p0_007_vc	2.187	4,57247E-4	30	0,18	RAM = 526 MB
Burgers_1Dp_2p0_008_vc	6.561	1,52416E-4	28	0,53	RAM = 527 MB
Burgers_1Dp_2p0_009_vc	19.683	5,08053E-5	26	1,46	RAM = 523 MB
Burgers_1Dp_2p0_010_vc	59.049	1,69351E-5	24	3,89	RAM = 525 MB
Burgers_1Dp_2p0_011_vc	177.147	5,64503E-6	21	10,50	RAM = 491 MB
Burgers_1Dp_2p0_012_vc	531.441	1,88168E-6	19	28,68	RAM = 529 MB
Burgers_1Dp_2p0_013_vc	1.594.323	6,27225E-7	18	81,28	RAM = 638 MB 1 m e 21 s
Burgers_1Dp_2p0_014_vc	4.782.969	2,09075E-7	16	219,09	RAM = 1,09 GB 3 m e 39 s
Burgers_1Dp_2p0_015_vc	14.348.907	6,96917E-8	14	697,45	RAM = 2,38 GB 11 m e 37 s
Burgers_1Dp_2p0_016_vc	43.046.721	2,32306E-8	12	1506,75	RAM = 6,24 GB 25 m e 06 s
Burgers_1Dp_2p0_017_vc	129.140.163	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.17: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume e termo fonte integrado numericamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Burgers_1Dp_3p0_v2_001_vc	1	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Burgers_1Dp_3p0_v2_001_vc	3	0,5	16	0,00	RAM = 539 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_002_vc	5	0,25	21	0,00	RAM = 531 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_003_vc	9	0,125	28	0,00	RAM = 539 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_004_vc	17	0,0625	34	0,00	RAM = 526 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_005_vc	33	0,03125	35	0,00	RAM = 537 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_006_vc	65	0,01563	34	0,00	RAM = 536 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_007_vc	129	0,00781	34	0,00	RAM = 539 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_008_vc	257	0,00391	34	0,01	RAM = 531 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_009_vc	513	0,00195	32	0,04	RAM = 534 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_010_vc	1.025	9,76563E-4	31	0,09	RAM = 535 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_011_vc	2.049	4,88281E-4	31	0,17	RAM = 539 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_012_vc	4.097	2,44141E-4	29	0,34	RAM = 536 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_013_vc	8.193	1,2207E-4	28	0,65	RAM = 551 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_014_vc	16.385	6,10352E-5	26	1,32	RAM = 548 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_015_vc	32.769	3,05176E-5	24	2,42	RAM = 547 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_016_vc	65.537	1,52588E-5	21	4,89	RAM = 541 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_017_vc	131.073	7,62939E-6	22	9,34	RAM = 554 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_018_vc	262.145	3,8147E-6	21	18,01	RAM = 574 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_019_vc	524.289	1,90735E-6	19	34,71	RAM = 604 MB
Burgers_1Dp_3p0_v2_020_vc	1.048.577	9,53674E-7	18	66,73	RAM = 677 MB 1 m e 06 s
Burgers_1Dp_3p0_v2_021_vc	2.097.153	4,76837E-7	16	122,42	RAM = 824 MB 2 m e 02 s
Burgers_1Dp_3p0_v2_022_vc	4.194.305	2,38419E-7	15	255,75	RAM = 1,08 GB 4 m e 15 s
Burgers_1Dp_3p0_v2_023_vc	8.388.609	1,19209E-7	15	458,52	RAM = 1,64 GB 7 m e 38 s
Burgers_1Dp_3p0_v2_024_vc	16.777.217	5,96046E-8	12	934,81	RAM = 2,37 GB 15 m e 34 s
Burgers_1Dp_3p0_v2_025_vc	33.554.433	2,98023E-8	13	1783,57	RAM = 4,27 GB 29 m e 43 s
Burgers_1Dp_3p0_v2_026_vc	67.108.865	1,49012E-8	11	3076,01	RAM = 7,57 GB 51 m e 16 s
Burgers_1Dp_3p0_v2_027_vc	134.217.729	---	---	---	RAM = excede a memória

Tabela C.18: Identificação das simulações para volumes ímpares com a forma com volume de espessura zero e termo fonte integrado numericamente

Caso	N	Δx	itmax	tcpu (s)	Memória
Burgers_1Dp_4p0_v2_001_vc	1	---	---	---	RAM = volume insuficiente
Burgers_1Dp_4p0_v2_001_vc	5	0,33333	83	0,00	RAM = 492 MB
Burgers_1Dp_4p0_v2_002_vc	11	0,11111	53	0,00	RAM = 486 MB
Burgers_1Dp_4p0_v2_003_vc	29	0,03704	38	0,00	RAM = 491 MB
Burgers_1Dp_4p0_v2_004_vc	83	0,01235	37	0,00	RAM = 498 MB
Burgers_1Dp_4p0_v2_005_vc	245	0,00412	36	0,01	RAM = 496 MB
Burgers_1Dp_4p0_v2_006_vc	731	0,00137	33	0,07	RAM = 492 MB
Burgers_1Dp_4p0_v2_007_vc	2.189	4,57247E-4	32	0,18	RAM = 493 MB
Burgers_1Dp_4p0_v2_008_vc	6.563	1,52416E-4	30	0,57	RAM = 495 MB
Burgers_1Dp_4p0_v2_009_vc	19.685	5,08053E-5	29	1,59	RAM = 493 MB
Burgers_1Dp_4p0_v2_010_vc	59.051	1,69351E-5	28	4,54	RAM = 487 MB
Burgers_1Dp_4p0_v2_011_vc	177.149	5,64503E-6	26	12,51	RAM = 513 MB
Burgers_1Dp_4p0_v2_012_vc	531.443	1,88168E-6	24	37,28	RAM = 559 MB
Burgers_1Dp_4p0_v2_013_vc	1.594.325	6,27225E-7	23	110,23	RAM = 647 MB 1 m e 50 s
Burgers_1Dp_4p0_v2_014_vc	4.782.971	2,09075E-7	18	319,82	RAM = 1,10 GB 5 m e 19 s
Burgers_1Dp_4p0_v2_015_vc	14.348.909	6,96917E-8	15	894,67	RAM = 2,09 GB 14 m e 54 s
Burgers_1Dp_4p0_v2_016_vc	43.046.723	2,32306E-8	13	2520,92	RAM = 5,34 GB 42 m e 01 s
Burgers_1Dp_4p0_v2_017_vc	129.140.165	---	---	---	RAM = excede a memória

APÊNDICE D. Análise dos coeficientes das formas de aplicar condições de contorno

Este apêndice mostra a análise realizada com os coeficientes das três equações governantes. Foram analisados os coeficientes para os termos difusivos e advectivos para as faces leste (e) e oeste (w) empregando as quatro formas de aplicar as condições de contorno.

CONDIÇÕES DE CONTORNO SEM VOLUME FICTÍCIO

- Face oeste (w):

para $P = 0$, a aproximação para este volume é:

$$\phi_{cc} = \phi_w = \phi_a = 0 \quad (D.1)$$

para $P =$ volumes internos, tem-se:

$$\phi_w = \phi_{cc} \quad \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_w = 2 \frac{(\phi_P - \phi_{cc})}{\Delta x} \quad (D.2)$$

Substituindo $\phi_{cc} = 0$, os coeficientes assumem os valores de:

$$\phi_w = 0 \quad \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_w = \frac{2\phi_P}{\Delta x} \quad (D.3)$$

- Face leste (e):

para $P = N$, a aproximação para este volume é:

$$\phi_{cc} = \phi_e = \phi_b = 1 \quad (D.4)$$

para $P =$ volumes internos, tem-se:

$$\phi_e = \phi_{cc} \quad \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = 2 \frac{(\phi_{cc} - \phi_P)}{\Delta x} \quad (D.5)$$

Substituindo $\phi_{cc} = 1$, os coeficientes assumem os valores de:

$$\phi_e = 1 \quad \frac{d\phi}{dx}\bigg|_e = 2 \frac{(1 - \phi_P)}{\Delta x} \quad (\text{D.6})$$

CONDIÇÕES DE CONTORNO COM VOLUME FICTÍCIO

- Face oeste (w):

para $P = 0$, tem-se $\phi_{cc} = \phi_w = \phi_a = 0$, a aproximação para este volume é:

$$\phi_{cc} = \frac{\phi_w + \phi_P}{2} \quad \Rightarrow \quad \phi_w = -\phi_P \quad (\text{D.7})$$

para $P = \text{volumes internos}$, tem-se:

$$\phi_w = \frac{\phi_w + \phi_P}{2} \quad \frac{d\phi}{dx}\bigg|_w = \frac{\phi_P - \phi_w}{\Delta x} \quad (\text{D.8})$$

Substituindo $\phi_w = -\phi_P$, os coeficientes assumem os valores de:

$$\phi_w = 0 \quad \frac{d\phi}{dx}\bigg|_w = \frac{2\phi_P}{\Delta x} \quad (\text{D.9})$$

- Face leste (e):

para $P = N$, tem-se $\phi_{cc} = \phi_e = \phi_b = 1$, a aproximação para este volume é:

$$\phi_{cc} = \frac{\phi_E + \phi_P}{2} \quad \Rightarrow \quad \phi_E = 2\phi_{cc} - \phi_P \quad (\text{D.10})$$

para $P = \text{volumes internos}$, tem-se:

$$\phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad \frac{d\phi}{dx}\bigg|_e = \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta x} \quad (\text{D.11})$$

Substituindo $\phi_E = 2\phi_{cc} - \phi_P$, os coeficientes assumem os valores de:

$$\phi_e = \phi_{cc} \quad \frac{d\phi}{dx}\bigg|_e = 2 \frac{(\phi_{cc} - \phi_P)}{\Delta x} \quad (\text{D.12})$$

e ainda, substituindo $\phi_{cc} = 1$ na Eq. (D.12):

$$\phi_e = 1 \quad \frac{d\phi}{dx}\bigg|_e = 2 \frac{(1 - \phi_p)}{\Delta x} \quad (D.13)$$

CONDIÇÕES DE CONTORNO COM MEIO-VOLUME

- Face oeste (w):

para $P = 0$, a aproximação para este volume é:

$$\phi_{cc} = \phi_a = \phi_w = 0 \quad (D.14)$$

para $P =$ volumes internos, tem-se:

$$\phi_w = \frac{\phi_w + \phi_p}{2} \quad \frac{d\phi}{dx}\bigg|_w = \frac{\phi_p - \phi_w}{\Delta x} \quad (D.15)$$

Substituindo $\phi_w = 0$, os coeficientes assumem os valores de:

$$\phi_w = \frac{\phi_p}{2} \quad \frac{d\phi}{dx}\bigg|_w = \frac{\phi_p}{\Delta x} \quad (D.16)$$

- Face leste (e):

para $P = N$, a aproximação para este volume é:

$$\phi_{cc} = \phi_b = \phi_E = 1 \quad (D.17)$$

para $P =$ volumes internos, tem-se:

$$\phi_e = \frac{\phi_p + \phi_E}{2} \quad \frac{d\phi}{dx}\bigg|_e = \frac{\phi_E - \phi_p}{\Delta x} \quad (D.18)$$

Substituindo $\phi_E = 1$, os coeficientes assumem os valores de:

$$\phi_e = \frac{\phi_p + 1}{2} \quad \frac{d\phi}{dx}\bigg|_e = \frac{1 - \phi_p}{\Delta x} \quad (D.19)$$

CONDIÇÕES DE CONTORNO COM VOLUME DE ESPESSURA ZERO

- Face oeste (w):

para $P = 0$, a aproximação para este volume é:

$$\phi_{cc} = \phi_a = \phi_w = 0 \quad (\text{D.20})$$

para $P =$ volumes internos, tem-se:

$$\phi_w = \phi_{cc} \quad \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_w = 2 \frac{(\phi_p - \phi_{cc})}{\Delta x} \quad (\text{D.21})$$

Substituindo $\phi_{cc} = 0$, os coeficientes assumem os valores de:

$$\phi_w = 0 \quad \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_w = \frac{2\phi_p}{\Delta x} \quad (\text{D.22})$$

- Face leste (e):

para $P = N$, a aproximação para este volume é:

$$\phi_{cc} = \phi_b = \phi_E = 1 \quad (\text{D.23})$$

para $P =$ volumes internos, tem-se:

$$\phi_e = \phi_{cc} \quad \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = 2 \frac{(\phi_{cc} - \phi_p)}{\Delta x} \quad (\text{D.24})$$

Substituindo $\phi_{cc} = 1$, os coeficientes assumem os valores de:

$$\phi_e = 1 \quad \left. \frac{d\phi}{dx} \right|_e = 2 \frac{(1 - \phi_p)}{\Delta x} \quad (\text{D.25})$$

APÊNDICE E. Tabelas do capítulo 4: Equação de Poisson

Neste apêndice constam as tabelas que representam os valores das figuras utilizadas pelo capítulo 4. As quatro primeiras tabelas trazem a comparação dos valores dos erros para as sete variáveis de interesse mudando a maneira de integração do termo fonte: integrado analiticamente e integrado pela regra do retângulo.

Na Tab. E.1 constam as variáveis T_{nod} e T_{med} . Na Tab. E.2 constam as variáveis $T_{m,ret}$ e $T_{m,trap}$. Na Tab. E.3 constam as variáveis de interesse I_{DDS} e I_{DDS-2} . E, finalmente, na Tab. E.4 consta a variável de interesse E_m .

Tabela E.1: Comparação do erro das variáveis de interesse (T_{nod}) e (T_{med}) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício

Δx	T_{nod} Fonte analítico	T_{nod} Fonte numérico	Δx	T_{med} Fonte analítico	T_{med} Fonte numérico
1	0,82586	0,09237	0,5	0,20086	0,06355
0,33333	0,12106	0,06272	0,25	0,05384	0,02408
0,11111	0,01402	0,00844	0,125	0,01372	0,00667
0,03704	0,00157	9,57742E-4	0,0625	0,00345	0,00171
0,01235	1,7403E-4	1,0667E-4	0,03125	8,62568E-4	4,30539E-4
0,00412	1,93378E-5	1,18554E-5	0,01563	2,15708E-4	1,07807E-4
0,00137	2,14866E-6	1,3173E-6	0,00781	5,3931E-5	2,69626E-5
4,57247E-4	2,3874E-7	1,46367E-7	0,00391	1,3483E-5	6,74133E-6
1,52416E-4	2,65266E-8	1,6263E-8	0,00195	3,37077E-6	1,68537E-6
5,08053E-5	2,9474E-9	1,807E-9	9,76563E-4	8,42694E-7	4,21346E-7
1,69351E-5	3,27489E-10	2,00778E-10	4,88281E-4	2,10674E-7	1,05337E-7
5,64503E-6	3,63877E-11	2,23087E-11	2,44141E-4	5,26684E-8	2,63342E-8
1,88168E-6	4,04308E-12	2,47874E-12	1,2207E-4	1,31671E-8	6,58355E-9
6,27225E-7	4,49231E-13	2,75416E-13	6,10352E-5	3,29177E-9	1,64589E-9
2,09075E-7	4,99145E-14	3,06018E-14	3,05176E-5	8,22943E-10	4,11472E-10
6,96917E-8	5,54606E-15	3,4002E-15	1,52588E-5	2,05736E-10	1,02868E-10
2,32306E-8	6,16229E-16	3,778E-16	7,62939E-6	5,1434E-11	2,5717E-11
			3,8147E-6	1,28585E-11	6,42925E-12
			1,90735E-6	3,21462E-12	1,60731E-12
			9,53674E-7	8,03656E-13	4,01828E-13
			4,76837E-7	2,00914E-13	1,00457E-13
			2,38419E-7	5,02285E-14	2,51142E-14
			1,19209E-7	1,25571E-14	6,27856E-15
			5,96046E-8	3,13928E-15	1,56964E-15
			2,98023E-8	7,8482E-16	3,9241E-16
			1,49012E-8	1,96205E-16	9,81025E-17

As Tabs. E.5 a E.11 comparam as sete variáveis de interesse entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno. Mostram o tamanho dos volumes de controle (Δx) e os valores dos erros de discretização para cada forma estudada.

Tabela E.2: Comparação do erro das variáveis de interesse ($T_{m,ret}$) e ($T_{m,trap}$) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício

Δx	$T_{m,ret}$ Fonte analítico	$T_{m,ret}$ Fonte numérico	$T_{m,trap}$ Fonte analítico	$T_{m,trap}$ Fonte numérico
0,5	0,31822	0,18091	0,16197	0,05899
0,25	0,08846	0,06385	0,04939	0,02722
0,125	0,02278	0,01747	0,01301	0,00786
0,0625	0,00574	0,00447	0,0033	0,00204
0,03125	0,00144	0,00112	8,26688E-4	5,13993E-4
0,01563	3,59432E-4	2,81335E-4	2,06844E-4	1,28786E-4
0,00781	8,98686E-5	7,0359E-5	5,17216E-5	3,22144E-5
0,00391	2,24678E-5	1,75913E-5	1,29311E-5	8,05473E-6
0,00195	5,617E-6	4,39793E-6	3,23281E-6	2,01375E-6
9,76563E-4	1,40425E-6	1,09949E-6	8,08206E-7	5,03443E-7
4,88281E-4	3,51063E-7	2,74873E-7	2,02052E-7	1,25861E-7
2,44141E-4	8,77658E-8	6,87182E-8	5,05129E-8	3,14653E-8
1,2207E-4	2,19415E-8	1,71795E-8	1,26282E-8	7,86632E-9
6,10352E-5	5,48536E-9	4,29489E-9	3,15706E-9	1,96658E-9
3,05176E-5	1,37134E-9	1,07372E-9	7,89264E-10	4,91645E-10
1,52588E-5	3,42835E-10	2,6843E-10	1,97316E-10	1,22911E-10
7,62939E-6	8,57088E-11	6,71076E-11	4,9329E-11	3,07278E-11
3,8147E-6	2,14272E-11	1,67769E-11	1,23323E-11	7,68195E-12
1,90735E-6	5,3568E-12	4,19422E-12	3,08306E-12	1,92049E-12
9,53674E-7	1,3392E-12	1,04856E-12	7,70766E-13	4,80122E-13
4,76837E-7	3,348E-13	2,62139E-13	1,92691E-13	1,2003E-13
2,38419E-7	8,37E-14	6,55348E-14	4,81729E-14	3,00076E-14
1,19209E-7	2,0925E-14	1,63837E-14	1,20432E-14	7,50191E-15
5,96046E-8	5,23125E-15	4,09592E-15	3,0108E-15	1,87548E-15
2,98023E-8	1,30781E-15	1,02398E-15	7,52701E-16	4,68869E-16
1,49012E-8	3,26953E-16	2,55995E-16	1,88175E-16	1,17217E-16

Tabela E.3: Comparação do erro das variáveis de interesse (I_{DDS}) e (I_{DDS-2}) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício

Δx	I_{DDS} Fonte analítico	I_{DDS} Fonte numérico	I_{DDS-2} Fonte analítico	I_{DDS-2} Fonte numérico
0,5	0,47356	0,15729	0,59999	0,25595
0,25	0,12694	0,05889	0,15509	0,0853
0,125	0,03234	0,01627	0,04216	0,02593
0,0625	0,00812	0,00417	0,01227	0,0083
0,03125	0,00203	0,00105	0,00395	0,00296
0,01563	5,08575E-4	2,62802E-4	0,00143	0,00118
0,00781	1,27153E-4	6,57262E-5	5,77537E-4	5,16081E-4
0,00391	3,17889E-5	1,64332E-5	2,54782E-4	2,39422E-4
0,00195	7,94727E-6	4,10839E-6	1,18899E-4	1,1506E-4
9,76563E-4	1,98682E-6	1,0271E-6	5,73273E-5	5,63676E-5
4,88281E-4	4,96705E-7	2,56776E-7	2,81332E-5	2,78933E-5
2,44141E-4	1,24176E-7	6,41941E-8	1,3934E-5	1,3874E-5
1,2207E-4	3,10441E-8	1,60485E-8	6,93384E-6	6,91885E-6
6,10352E-5	7,76102E-9	4,01213E-9	3,45863E-6	3,45488E-6
3,05176E-5	1,94026E-9	1,00303E-9	1,72724E-6	1,72631E-6
1,52588E-5	4,85064E-10	2,50758E-10	8,63104E-7	8,6287E-7
7,62939E-6	1,21266E-10	6,26895E-11	4,31423E-7	4,31364E-7
3,8147E-6	3,03165E-11	1,56724E-11	2,15679E-7	2,15664E-7
1,90735E-6	7,57912E-12	3,9181E-12	1,07831E-7	1,07828E-7
9,53674E-7	1,89478E-12	9,79524E-13	5,39137E-8	5,39128E-8
4,76837E-7	4,73695E-13	2,44881E-13	2,69563E-8	2,69561E-8
2,38419E-7	1,18424E-13	6,12203E-14	1,3478E-8	1,3478E-8
1,19209E-7	2,96059E-14	1,53051E-14	6,73899E-9	6,73897E-9
5,96046E-8	7,40149E-15	3,8267E-15	3,36949E-9	3,36948E-9
2,98023E-8	1,85037E-15	9,56567E-16	1,68474E-9	1,68474E-9
1,49012E-8	4,62593E-16	2,39142E-16	8,4237E-10	8,4237E-10

Tabela E.4: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as integrações analítica e pela regra do retângulo com volume fictício

Δx	E_m Fonte analítico	E_m Fonte numérico
0,5	0,27428	0,13698
0,25	0,07601	0,0514
0,125	0,01956	0,01425
0,0625	0,00493	0,00366
0,03125	0,00123	9,20419E-4
0,01563	3,08578E-4	2,30481E-4
0,00781	7,71535E-5	5,76439E-5
0,00391	1,92889E-5	1,44124E-5
0,00195	4,82227E-6	3,6032E-6
9,76563E-4	1,20557E-6	9,00807E-7
4,88281E-4	3,01393E-7	2,25202E-7
2,44141E-4	7,53482E-8	5,63005E-8
1,2207E-4	1,8837E-8	1,40751E-8
6,10352E-5	4,70926E-9	3,51878E-9
3,05176E-5	1,17732E-9	8,79696E-10
1,52588E-5	2,94329E-10	2,19924E-10
7,62939E-6	7,35822E-11	5,4981E-11
3,8147E-6	1,83956E-11	1,37452E-11
1,90735E-6	4,59889E-12	3,43631E-12
9,53674E-7	1,14972E-12	8,59078E-13
4,76837E-7	2,8743E-13	2,1477E-13
2,38419E-7	7,18576E-14	5,36924E-14
1,19209E-7	1,79644E-14	1,34231E-14
5,96046E-8	4,4911E-15	3,35577E-15
2,98023E-8	1,12278E-15	8,38943E-16
1,49012E-8	2,80694E-16	2,09736E-16

Tabela E.5: Comparação do erro da variável de interesse (T_{nod}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	T_{nod} Sem vol fict	T_{nod} Com vol fict	Δx	T_{nod} Com meio vol	Δx	T_{nod} Com esp zero
1	0,09237		0,5	0,16589	0,33333	0,06272
0,33333	0,06272	0,06272	0,25	0,05117	0,11111	0,00844
0,11111	0,00844	0,00844	0,125	0,01354	0,03704	9,57742E-4
0,03704	9,57742E-4	9,57742E-4	0,0625	0,00343	0,01235	1,0667E-4
0,01235	1,0667E-4	1,0667E-4	0,03125	8,61866E-4	0,00412	1,18554E-5
0,00412	1,18554E-5	1,18554E-5	0,01563	2,15664E-4	0,00137	1,3173E-6
0,00137	1,3173E-6	1,3173E-6	0,00781	5,39283E-5	4,57247E-4	1,46367E-7
4,57247E-4	1,46367E-7	1,46367E-7	0,00391	1,34828E-5	1,52416E-4	1,6263E-8
1,52416E-4	1,6263E-8	1,6263E-8	0,00195	3,37076E-6	5,08053E-5	1,807E-9
5,08053E-5	1,807E-9	1,807E-9	9,76563E-4	8,42693E-7	1,69351E-5	2,00778E-10
1,69351E-5	2,00778E-10	2,00778E-10	4,88281E-4	2,10673E-7	5,64503E-6	2,23087E-11
5,64503E-6	2,23087E-11	2,23087E-11	2,44141E-4	5,26684E-8	1,88168E-6	2,47874E-12
1,88168E-6	2,47874E-12	2,47874E-12	1,2207E-4	1,31671E-8	6,27225E-7	2,75416E-13
6,27225E-7	2,75416E-13	2,75416E-13	6,10352E-5	3,29177E-9	2,09075E-7	3,06018E-14
2,09075E-7	3,06018E-14	3,06018E-14	3,05176E-5	8,22943E-10	6,96917E-8	3,4002E-15
6,96917E-8	3,4002E-15	3,4002E-15	1,52588E-5	2,05736E-10	2,32306E-8	3,778E-16
2,32306E-8	3,778E-16	3,778E-16	7,62939E-6	5,1434E-11		
			3,8147E-6	1,28585E-11		
			1,90735E-6	3,21462E-12		
			9,53674E-7	8,03656E-13		
			4,76837E-7	2,00914E-13		
			2,38419E-7	5,02285E-14		
			1,19209E-7	1,25571E-14		
			5,96046E-8	3,13928E-15		
			2,98023E-8	7,8482E-16		
			1,49012E-8	1,96205E-16		

Tabela E.6: Comparação do erro da variável de interesse (T_{med}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	T_{med} Sem vol fict	T_{med} Com vol fict	Δx	T_{med} Com meio vol	Δx	T_{med} Com esp zero
0,5	0,06355	0,06355	0,33333	0,11015	0,25	0,02408
0,25	0,02408	0,02408	0,11111	0,01387	0,125	0,00667
0,125	0,00667	0,00667	0,03704	0,00156	0,0625	0,00171
0,0625	0,00171	0,00171	0,01235	1,74006E-4	0,03125	4,30539E-4
0,03125	4,30539E-4	4,30539E-4	0,00412	1,93375E-5	0,01563	1,07807E-4
0,01563	1,07807E-4	1,07807E-4	0,00137	2,14865E-6	0,00781	2,69626E-5
0,00781	2,69626E-5	2,69626E-5	4,57247E-4	2,3874E-7	0,00391	6,74133E-6
0,00391	6,74133E-6	6,74133E-6	1,52416E-4	2,65266E-8	0,00195	1,68537E-6
0,00195	1,68537E-6	1,68537E-6	5,08053E-5	2,9474E-9	9,76563E-4	4,21346E-7
9,76563E-4	4,21346E-7	4,21346E-7	1,69351E-5	3,27489E-10	4,88281E-4	1,05337E-7
4,88281E-4	1,05337E-7	1,05337E-7	5,64503E-6	3,63877E-11	2,44141E-4	2,63342E-8
2,44141E-4	2,63342E-8	2,63342E-8	1,88168E-6	4,04308E-12	1,2207E-4	6,58355E-9
1,2207E-4	6,58355E-9	6,58355E-9	6,27225E-7	4,49231E-13	6,10352E-5	1,64589E-9
6,10352E-5	1,64589E-9	1,64589E-9	2,09075E-7	4,99145E-14	3,05176E-5	4,11472E-10
3,05176E-5	4,11472E-10	4,11472E-10	6,96917E-8	5,54606E-15	1,52588E-5	1,02868E-10
1,52588E-5	1,02868E-10	1,02868E-10	2,32306E-8	6,16229E-16	7,62939E-6	2,5717E-11
7,62939E-6	2,5717E-11	2,5717E-11			3,8147E-6	6,42925E-12
3,8147E-6	6,42925E-12	6,42925E-12			1,90735E-6	1,60731E-12
1,90735E-6	1,60731E-12	1,60731E-12			9,53674E-7	4,01828E-13
9,53674E-7	4,01828E-13	4,01828E-13			4,76837E-7	1,00457E-13
4,76837E-7	1,00457E-13	1,00457E-13			2,38419E-7	2,51142E-14
2,38419E-7	2,51142E-14	2,51142E-14			1,19209E-7	6,27856E-15
1,19209E-7	6,27856E-15	6,27856E-15			5,96046E-8	1,56964E-15
5,96046E-8	1,56964E-15	1,56964E-15			2,98023E-8	3,9241E-16
2,98023E-8	3,9241E-16	3,9241E-16			1,49012E-8	9,81025E-17
1,49012E-8	9,81025E-17	9,81025E-17				

Tabela E.7: Comparação do erro da variável de interesse ($T_{m,ret}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	$T_{m,ret}$ Sem vol fict	$T_{m,ret}$ Com vol fict	Δx	$T_{m,ret}$ Com meio vol	Δx	$T_{m,ret}$ Com esp zero
0,5	0,18091	0,18091	0,33333	0,09746	0,25	0,06385
0,25	0,06385	0,06385	0,11111	0,01276	0,125	0,01747
0,125	0,01747	0,01747	0,03704	0,00144	0,0625	0,00447
0,0625	0,00447	0,00447	0,01235	1,60878E-4	0,03125	0,00112
0,03125	0,00112	0,00112	0,00412	1,78795E-5	0,01563	2,81335E-4
0,01563	2,81335E-4	2,81335E-4	0,00137	1,98667E-6	0,00781	7,0359E-5
0,00781	7,0359E-5	7,0359E-5	4,57247E-4	2,20741E-7	0,00391	1,75913E-5
0,00391	1,75913E-5	1,75913E-5	1,52416E-4	2,45268E-8	0,00195	4,39793E-6
0,00195	4,39793E-6	4,39793E-6	5,08053E-5	2,7252E-9	9,76563E-4	1,09949E-6
9,76563E-4	1,09949E-6	1,09949E-6	1,69351E-5	3,028E-10	4,88281E-4	2,74873E-7
4,88281E-4	2,74873E-7	2,74873E-7	5,64503E-6	3,36445E-11	2,44141E-4	6,87182E-8
2,44141E-4	6,87182E-8	6,87182E-8	1,88168E-6	3,73828E-12	1,2207E-4	1,71795E-8
1,2207E-4	1,71795E-8	1,71795E-8	6,27225E-7	4,15364E-13	6,10352E-5	4,29489E-9
6,10352E-5	4,29489E-9	4,29489E-9	2,09075E-7	4,61515E-14	3,05176E-5	1,07372E-9
3,05176E-5	1,07372E-9	1,07372E-9	6,96917E-8	5,12795E-15	1,52588E-5	2,6843E-10
1,52588E-5	2,6843E-10	2,6843E-10	2,32306E-8	5,69772E-16	7,62939E-6	6,71076E-11
7,62939E-6	6,71076E-11	6,71076E-11			3,8147E-6	1,67769E-11
3,8147E-6	1,67769E-11	1,67769E-11			1,90735E-6	4,19422E-12
1,90735E-6	4,19422E-12	4,19422E-12			9,53674E-7	1,04856E-12
9,53674E-7	1,04856E-12	1,04856E-12			4,76837E-7	2,62139E-13
4,76837E-7	2,62139E-13	2,62139E-13			2,38419E-7	6,55348E-14
2,38419E-7	6,55348E-14	6,55348E-14			1,19209E-7	1,63837E-14
1,19209E-7	1,63837E-14	1,63837E-14			5,96046E-8	4,09592E-15
5,96046E-8	4,09592E-15	4,09592E-15			2,98023E-8	1,02398E-15
2,98023E-8	1,02398E-15	1,02398E-15			1,49012E-8	2,55995E-16
1,49012E-8	2,55995E-16	2,55995E-16				

Tabela E.8: Comparação do erro da variável de interesse ($T_{m,trap}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	$T_{m,trap}$ Sem vol fict	$T_{m,trap}$ Com vol fict	Δx	$T_{m,trap}$ Com meio vol	Δx	$T_{m,trap}$ Com esp zero
0,5	0,05899	0,05899	0,33333	0,09746	0,25	0,02722
0,25	0,02722	0,02722	0,11111	0,01276	0,125	0,00786
0,125	0,00786	0,00786	0,03704	0,00144	0,0625	0,00204
0,0625	0,00204	0,00204	0,01235	1,60878E-4	0,03125	5,13993E-4
0,03125	5,13993E-4	5,13993E-4	0,00412	1,78795E-5	0,01563	1,28786E-4
0,01563	1,28786E-4	1,28786E-4	0,00137	1,98667E-6	0,00781	3,22144E-5
0,00781	3,22144E-5	3,22144E-5	4,57247E-4	2,20741E-7	0,00391	8,05473E-6
0,00391	8,05473E-6	8,05473E-6	1,52416E-4	2,45268E-8	0,00195	2,01375E-6
0,00195	2,01375E-6	2,01375E-6	5,08053E-5	2,7252E-9	9,76563E-4	5,03443E-7
9,76563E-4	5,03443E-7	5,03443E-7	1,69351E-5	3,028E-10	4,88281E-4	1,25861E-7
4,88281E-4	1,25861E-7	1,25861E-7	5,64503E-6	3,36445E-11	2,44141E-4	3,14653E-8
2,44141E-4	3,14653E-8	3,14653E-8	1,88168E-6	3,73828E-12	1,2207E-4	7,86632E-9
1,2207E-4	7,86632E-9	7,86632E-9	6,27225E-7	4,15364E-13	6,10352E-5	1,96658E-9
6,10352E-5	1,96658E-9	1,96658E-9	2,09075E-7	4,61515E-14	3,05176E-5	4,91645E-10
3,05176E-5	4,91645E-10	4,91645E-10	6,96917E-8	5,12795E-15	1,52588E-5	1,22911E-10
1,52588E-5	1,22911E-10	1,22911E-10	2,32306E-8	5,69772E-16	7,62939E-6	3,07278E-11
7,62939E-6	3,07278E-11	3,07278E-11			3,8147E-6	7,68195E-12
3,8147E-6	7,68195E-12	7,68195E-12			1,90735E-6	1,92049E-12
1,90735E-6	1,92049E-12	1,92049E-12			9,53674E-7	4,80122E-13
9,53674E-7	4,80122E-13	4,80122E-13			4,76837E-7	1,2003E-13
4,76837E-7	1,2003E-13	1,2003E-13			2,38419E-7	3,00076E-14
2,38419E-7	3,00076E-14	3,00076E-14			1,19209E-7	7,50191E-15
1,19209E-7	7,50191E-15	7,50191E-15			5,96046E-8	1,87548E-15
5,96046E-8	1,87548E-15	1,87548E-15			2,98023E-8	4,68869E-16
2,98023E-8	4,68869E-16	4,68869E-16			1,49012E-8	1,17217E-16
1,49012E-8	1,17217E-16	1,17217E-16				

Tabela E.9: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	E_m Sem vol fict	E_m Com vol fict	Δx	E_m Com meio vol	Δx	E_m Com esp zero
0,5	0,13698	0,13698	0,33333	0,07976	0,25	0,17996
0,25	0,0514	0,0514	0,11111	0,0086	0,125	0,04834
0,125	0,01425	0,01425	0,03704	9,07194E-4	0,0625	0,01271
0,0625	0,00366	0,00366	0,01235	9,85924E-5	0,03125	0,00327
0,03125	9,20419E-4	9,20419E-4	0,00412	1,0868E-5	0,01563	8,31159E-4
0,01563	2,30481E-4	2,30481E-4	0,00137	1,20429E-6	0,00781	2,09503E-4
0,00781	5,76439E-5	5,76439E-5	4,57247E-4	1,33688E-7	0,00391	5,25954E-5
0,00391	1,44124E-5	1,44124E-5	1,52416E-4	1,48497E-8	0,00195	1,31766E-5
0,00195	3,6032E-6	3,6032E-6	5,08053E-5	1,6498E-9	9,76563E-4	3,29766E-6
9,76563E-4	9,00807E-7	9,00807E-7	1,69351E-5	1,83305E-10	4,88281E-4	8,24853E-7
4,88281E-4	2,25202E-7	2,25202E-7	5,64503E-6	2,03669E-11	2,44141E-4	2,06268E-7
2,44141E-4	5,63005E-8	5,63005E-8	1,88168E-6	2,26299E-12	1,2207E-4	5,15739E-8
1,2207E-4	1,40751E-8	1,40751E-8	6,27225E-7	2,51442E-13	6,10352E-5	1,28943E-8
6,10352E-5	3,51878E-9	3,51878E-9	2,09075E-7	2,7938E-14	3,05176E-5	3,22369E-9
3,05176E-5	8,79696E-10	8,79696E-10	6,96917E-8	3,10423E-15	1,52588E-5	8,05936E-10
1,52588E-5	2,19924E-10	2,19924E-10	2,32306E-8	3,44914E-16	7,62939E-6	2,01486E-10
7,62939E-6	5,4981E-11	5,4981E-11			3,8147E-6	5,03716E-11
3,8147E-6	1,37452E-11	1,37452E-11			1,90735E-6	1,25929E-11
1,90735E-6	3,43631E-12	3,43631E-12			9,53674E-7	3,14824E-12
9,53674E-7	8,59078E-13	8,59078E-13			4,76837E-7	7,87059E-13
4,76837E-7	2,1477E-13	2,1477E-13			2,38419E-7	1,96765E-13
2,38419E-7	5,36924E-14	5,36924E-14			1,19209E-7	4,91912E-14
1,19209E-7	1,34231E-14	1,34231E-14			5,96046E-8	1,22978E-14
5,96046E-8	3,35577E-15	3,35577E-15			2,98023E-8	3,07445E-15
2,98023E-8	8,38943E-16	8,38943E-16			1,49012E-8	7,68613E-16
1,49012E-8	2,09736E-16	2,09736E-16				

Tabela E.10: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	I_{DDS} Sem vol fict	I_{DDS} Com vol fict	Δx	I_{DDS} Com meio vol	Δx	I_{DDS} Com esp zero
0,5	0,15729	0,15729	0,33333	0,23833	0,25	0,05889
0,25	0,05889	0,05889	0,11111	0,03562	0,125	0,01627
0,125	0,01627	0,01627	0,03704	0,00609	0,0625	0,00417
0,0625	0,00417	0,00417	0,01235	0,00138	0,03125	0,00105
0,03125	0,00105	0,00105	0,00412	3,85431E-4	0,01563	2,62802E-4
0,01563	2,62802E-4	2,62802E-4	0,00137	1,20371E-4	0,00781	6,57262E-5
0,00781	6,57262E-5	6,57262E-5	4,57247E-4	3,9223E-5	0,00391	1,64332E-5
0,00391	1,64332E-5	1,64332E-5	1,52416E-4	1,29742E-5	0,00195	4,10839E-6
0,00195	4,10839E-6	4,10839E-6	5,08053E-5	4,31363E-6	9,76563E-4	1,0271E-6
9,76563E-4	1,0271E-6	1,0271E-6	1,69351E-5	1,43664E-6	4,88281E-4	2,56776E-7
4,88281E-4	2,56776E-7	2,56776E-7	5,64503E-6	4,78743E-7	2,44141E-4	6,41941E-8
2,44141E-4	6,41941E-8	6,41941E-8	1,88168E-6	1,59566E-7	1,2207E-4	1,60485E-8
1,2207E-4	1,60485E-8	1,60485E-8	6,27225E-7	5,31869E-8	6,10352E-5	4,01213E-9
6,10352E-5	4,01213E-9	4,01213E-9	2,09075E-7	1,77288E-8	3,05176E-5	1,00303E-9
3,05176E-5	1,00303E-9	1,00303E-9	6,96917E-8	5,90957E-9	1,52588E-5	2,50758E-10
1,52588E-5	2,50758E-10	2,50758E-10	2,32306E-8	1,96985E-9	7,62939E-6	6,26895E-11
7,62939E-6	6,26895E-11	6,26895E-11			3,8147E-6	1,56724E-11
3,8147E-6	1,56724E-11	1,56724E-11			1,90735E-6	3,9181E-12
1,90735E-6	3,9181E-12	3,9181E-12			9,53674E-7	9,79524E-13
9,53674E-7	9,79524E-13	9,79524E-13			4,76837E-7	2,44881E-13
4,76837E-7	2,44881E-13	2,44881E-13			2,38419E-7	6,12203E-14
2,38419E-7	6,12203E-14	6,12203E-14			1,19209E-7	1,53051E-14
1,19209E-7	1,53051E-14	1,53051E-14			5,96046E-8	3,82627E-15
5,96046E-8	3,82627E-15	3,82627E-15			2,98023E-8	9,56567E-16
2,98023E-8	9,56567E-16	9,56567E-16			1,49012E-8	2,39142E-16
1,49012E-8	2,39142E-16	2,39142E-16				

Tabela E.11: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS-2}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	I_{DDS-2} Sem vol fict	I_{DDS-2} Com vol fict	Δx	I_{DDS-2} Com meio vol	Δx	I_{DDS-2} Com esp zero
0,5	0,25595	0,25595	0,33333	0,08868	0,25	0,0853
0,25	0,0853	0,0853	0,11111	0,0192	0,125	0,02593
0,125	0,02593	0,02593	0,03704	0,00231	0,0625	0,0083
0,0625	0,0083	0,0083	0,01235	2,61585E-4	0,03125	0,00296
0,03125	0,00296	0,00296	0,00412	2,92229E-5	0,01563	0,00118
0,01563	0,00118	0,00118	0,00137	3,25258E-6	0,00781	5,16081E-4
0,00781	5,16081E-4	5,16081E-4	4,57247E-4	3,61602E-7	0,00391	2,39422E-4
0,00391	2,39422E-4	2,39422E-4	1,52416E-4	4,01856E-8	0,00195	1,1506E-4
0,00195	1,1506E-4	1,1506E-4	5,08053E-5	4,46534E-9	9,76563E-4	5,63676E-5
9,76563E-4	5,63676E-5	5,63676E-5	1,69351E-5	4,96159E-10	4,88281E-4	2,78933E-5
4,88281E-4	2,78933E-5	2,78933E-5	5,64503E-6	5,51292E-11	2,44141E-4	1,3874E-5
2,44141E-4	1,3874E-5	1,3874E-5	1,88168E-6	6,12548E-12	1,2207E-4	6,91885E-6
1,2207E-4	6,91885E-6	6,91885E-6	6,27225E-7	6,80609E-13	6,10352E-5	3,45488E-6
6,10352E-5	3,45488E-6	3,45488E-6	2,09075E-7	7,56233E-14	3,05176E-5	1,72631E-6
3,05176E-5	1,72631E-6	1,72631E-6	6,96917E-8	8,40259E-15	1,52588E-5	8,6287E-7
1,52588E-5	8,6287E-7	8,6287E-7	2,32306E-8	9,33621E-16	7,62939E-6	4,31364E-7
7,62939E-6	4,31364E-7	4,31364E-7			3,8147E-6	2,15664E-7
3,8147E-6	2,15664E-7	2,15664E-7			1,90735E-6	1,07828E-7
1,90735E-6	1,07828E-7	1,07828E-7			9,53674E-7	5,39128E-8
9,53674E-7	5,39128E-8	5,39128E-8			4,76837E-7	2,69561E-8
4,76837E-7	2,69561E-8	2,69561E-8			2,38419E-7	1,3478E-8
2,38419E-7	1,3478E-8	1,3478E-8			1,19209E-7	6,73897E-9
1,19209E-7	6,73897E-9	6,73897E-9			5,96046E-8	3,36948E-9
5,96046E-8	3,36948E-9	3,36948E-9			2,98023E-8	1,68474E-9
2,98023E-8	1,68474E-9	1,68474E-9			1,49012E-8	8,4237E-10
1,49012E-8	8,4237E-10	8,4237E-10				

As Tabs. E.12 a E.18 mostram os valores da ordem assintótica (pL) obtida *a priori* e das ordens efetiva (pE) e aparente (pU) do erro de discretização obtidas *a posteriori* para o termo fonte integrado analiticamente e pela regra do retângulo.

Tabela E.12: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{nod}) com as integrações analítica e regra do retângulo

Δx	pL_{nod}	pE_{nod} Fonte analítico	pU_{nod} Fonte analítico	pE_{nod} Fonte numérico	pU_{nod} Fonte numérico
1	2,000000000000000				
0,33333	2,000000000000000	1,74779200501901		0,352371227473211	
0,11111	2,000000000000000	1,96220315668461	1,71555759975243	1,82601009498783	0,550476701286758
0,03704	2,000000000000000	1,99562560202415	1,95791453912591	1,98047957973664	1,80419231793848
0,01235	2,000000000000000	1,99951168805303	1,99513837859561	1,997830000000000	1,97828164511878
0,00412	2,000000000000000	1,99994571496070	1,99945741649385	1,99975867496280	1,99758673043475
0,00137	2,000000000000000	1,99999396798114	1,99993968310831	1,99997318569054	1,99973185667823
4,57247E-4	2,000000000000000	1,99999932977139	1,99999329775458	1,99999702062714	1,99997020626861
1,52416E-4	2,000000000000000	1,99999992553010	1,99999925530151	1,9999966895851	1,99999668958504
5,08053E-5	2,000000000000000	1,99999999172557	1,99999991725567	1,9999996321761	1,99999963217611
1,69351E-5	2,000000000000000	1,9999999908062	1,99999999080618	1,9999999591307	1,99999995913068
5,64503E-6	2,000000000000000	1,9999999989785	1,99999999897846	1,9999999954590	1,99999999545896
1,88168E-6	2,000000000000000	1,9999999998865	1,99999999988650	1,9999999994954	1,99999999949544
6,27225E-7	2,000000000000000	1,9999999999874	1,99999999998739	1,9999999999439	1,99999999994394
2,09075E-7	2,000000000000000	2,00000000000004	1,9999999999857	1,9999999999967	1,99999999999373
6,96917E-8	2,000000000000000	1,9999999999693	2,00000000000043	1,9999999999501	2,00000000000026
2,32306E-8	2,000000000000000	2,00000000022106	1,99999999996892	2,00000000035970	1,99999999994942

Tabela E.13: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{med}) com as integrações analítica e regra do retângulo

Δx	pL_{med}	pE_{med} Fonte analítico	pU_{med} Fonte analítico	pE_{med} Fonte numérico	pU_{med} Fonte numérico
0,5	2,000000000000000				
0,25	2,000000000000000	1,89942434885691		1,39994966712970	
0,125	2,000000000000000	1,97264861872531	1,87351184883786	1,85198496806144	1,18070308217975
0,0625	2,000000000000000	1,99300841602897	1,96575311137246	1,96301807782856	1,81160913835443
0,03125	2,000000000000000	1,99824221829837	1,99125674173387	1,99075438788667	1,95357214732054
0,01563	2,000000000000000	1,99955993225394	1,99780253389606	1,99768856565732	1,98843060501762
0,00781	2,000000000000000	1,99988994409815	1,99944990033667	1,99942213909738	1,99710993560240
0,00391	2,000000000000000	1,99997248358810	1,99986242918569	1,9998553462392	1,99927762569020
0,00195	2,000000000000000	1,99999312074473	1,99996560442656	1,99996388364649	1,99981941526910
9,76563E-4	2,000000000000000	1,99999828017666	1,99999140092725	1,99999097091103	1,99995485436995
4,88281E-4	2,000000000000000	1,99999957004357	1,99999785022060	1,99999774272772	1,99998871362702
2,44141E-4	2,000000000000000	1,99999989251086	1,99999946255445	1,99999943568193	1,99999717840891
1,2207E-4	2,000000000000000	1,9999997312771	1,99999986563857	1,99999985892048	1,99999929460236
6,10352E-5	2,000000000000000	1,99999999328193	1,99999996640964	1,99999996473012	1,99999982365060
3,05176E-5	2,000000000000000	1,99999999832048	1,99999999160241	1,99999999118253	1,99999995591265
1,52588E-5	2,000000000000000	1,99999999958012	1,99999999790060	1,99999999779563	1,99999998897816
7,62939E-6	2,000000000000000	1,99999999989503	1,99999999947515	1,99999999944891	1,99999999972454
3,8147E-6	2,000000000000000	1,9999999997376	1,99999999986879	1,99999999986223	1,99999999931114
1,90735E-6	2,000000000000000	1,9999999999344	1,99999999996720	1,99999999996556	1,99999999982778
9,53674E-7	2,000000000000000	1,9999999999836	1,99999999999180	1,99999999999138	1,99999999995695
4,76837E-7	2,000000000000000	1,99999999999956	1,99999999999795	1,99999999999779	1,99999999998924
2,38419E-7	2,000000000000000	1,99999999999994	1,99999999999944	1,99999999999954	1,99999999999721
1,19209E-7	2,000000000000000	2,000000000000170	1,99999999999935	2,000000000000332	1,99999999999828
5,96046E-8	2,000000000000000	2,00000000045523	1,99999999985053	2,00000000091043	1,99999999970095
2,98023E-8	2,000000000000000	2,00000000376413	1,999999999935226	2,000000000752825	1,999999999870450
1,49012E-8	2,000000000000000	1,999999999593384	2,000000000637422	1,999999999186768	2,000000001274843

Tabela E.14: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,ret}$) com as integrações analítica e regra do retângulo

Δx	pL_{ret}	pE_{ret} Fonte analítico	pU_{ret} Fonte analítico	pE_{ret} Fonte numérico	pU_{ret} Fonte numérico
0,5	2,000000000000000				
0,25	2,000000000000000	1,84695478449439		1,50249622040573	
0,125	2,000000000000000	1,95748863831795	1,80655944016388	1,86966179781453	1,33570125202799
0,0625	2,000000000000000	1,98907226369197	1,94669623229814	1,96698490721307	1,83463588329138
0,03125	2,000000000000000	1,99724871735554	1,98632947472612	1,99171831977075	1,95858097783169
0,01563	2,000000000000000	1,99931096029186	1,99656020899801	1,99792781973974	1,98963855006121
0,00781	2,000000000000000	1,99982766372876	1,99913865723753	1,99948184467035	1,99740919085924
0,00391	2,000000000000000	1,99995691115827	1,99978457696320	1,99987045427211	1,99935226935784
0,00195	2,000000000000000	1,99998922749116	1,99994613877919	1,99996761313700	1,99983806556026
9,76563E-4	2,000000000000000	1,99999730685414	1,99998653435341	1,99999190325731	1,99995951627876
4,88281E-4	2,000000000000000	1,99999932671237	1,99999663356701	1,99999797581264	1,99998987906273
2,44141E-4	2,000000000000000	1,99999983167802	1,99999915839042	1,99999949395306	1,99999746976525
1,2207E-4	2,000000000000000	1,99999995791950	1,9999978959752	1,9999987348826	1,99999936744128
6,10352E-5	2,000000000000000	1,9999998947987	1,99999994739938	1,9999996837206	1,99999984186032
3,05176E-5	2,000000000000000	1,9999999736997	1,99999998684984	1,9999999209302	1,99999996046508
1,52588E-5	2,000000000000000	1,9999999934249	1,99999999671246	1,9999999802325	1,99999999011627
7,62939E-6	2,000000000000000	1,9999999983562	1,99999999917812	1,9999999950581	1,99999999752907
3,8147E-6	2,000000000000000	1,9999999995891	1,99999999979453	1,99999999987645	1,99999999938227
1,90735E-6	2,000000000000000	1,9999999998973	1,99999999994863	1,9999999999611	1,99999999984557
9,53674E-7	2,000000000000000	1,9999999999743	1,99999999998716	1,99999999999228	1,99999999996139
4,76837E-7	2,000000000000000	1,9999999999934	1,99999999999679	1,99999999999805	1,99999999999035
2,38419E-7	2,000000000000000	1,99999999999987	1,99999999999917	1,99999999999956	1,99999999999755
1,19209E-7	2,000000000000000	2,000000000000070	1,99999999999960	2,000000000000082	1,99999999999914
5,96046E-8	2,000000000000000	2,00000000022038	1,99999999992747	2,00000000028144	1,99999999990728
2,98023E-8	2,000000000000000	2,00000000138098	1,99999999983351	2,00000000176376	1,99999999978734
1,49012E-8	2,000000000000000	1,99999999787953	2,000000000254813	1,99999999729177	2,000000000325443

Tabela E.15: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,trap}$) com as integrações analítica e regra do retângulo

Δx	pL_{trap}	pE_{trap} Fonte analítico	pU_{trap} Fonte analítico	pE_{trap} Fonte numérico	pU_{trap} Fonte numérico
0,5	2,000000000000000				
0,25	2,000000000000000	1,71326291163866		1,11571390516511	
0,125	2,000000000000000	1,92473484189872	1,62943550504053	1,79143159515108	0,714677649144527
0,0625	2,000000000000000	1,98092369919274	1,90516308153552	1,94829875731879	1,73227724074867
0,03125	2,000000000000000	1,99521404703005	1,97610731650771	1,98709799474204	1,93497135223782
0,01563	2,000000000000000	1,99880244682643	1,99401460008332	1,99677589179101	1,98384786362711
0,00781	2,000000000000000	1,99970054498996	1,99850287358074	1,99919405903531	1,99596833298361
0,00391	2,000000000000000	1,99992513207522	1,99962566967740	1,99979852012400	1,99899247817747
0,00195	2,000000000000000	1,99998128275800	1,99990641437151	1,99994963036609	1,99974814418080
9,76563E-4	2,000000000000000	1,99999532067320	1,99997660340234	1,99998740761246	1,99993703758425
4,88281E-4	2,000000000000000	1,99999883016728	1,99999415083868	1,99999685190442	1,99998425949224
2,44141E-4	2,000000000000000	1,99999970754176	1,99999853770892	1,99999921297619	1,99999606487907
1,2207E-4	2,000000000000000	1,99999992688544	1,99999963442718	1,99999980324405	1,99999901622014
6,10352E-5	2,000000000000000	1,99999998172136	1,99999990860679	1,99999995081101	1,99999975405506
3,05176E-5	2,000000000000000	1,99999999543034	1,99999997715170	1,99999998770275	1,99999993851377
1,52588E-5	2,000000000000000	1,99999999885758	1,99999999428792	1,99999999692569	1,99999998462844
7,62939E-6	2,000000000000000	1,99999999971440	1,99999999857198	1,99999999923142	1,99999999615711
3,8147E-6	2,000000000000000	1,99999999992860	1,99999999964300	1,99999999980786	1,99999999903928
1,90735E-6	2,000000000000000	1,99999999998215	1,99999999991075	1,99999999995196	1,99999999975982
9,53674E-7	2,000000000000000	1,99999999999553	1,99999999997769	1,99999999998798	1,99999999993996
4,76837E-7	2,000000000000000	1,99999999999886	1,99999999999442	1,99999999999696	1,99999999998499
2,38419E-7	2,000000000000000	1,99999999999978	1,99999999999856	1,99999999999934	1,99999999999617
1,19209E-7	2,000000000000000	2,0000000000000121	1,99999999999930	2,000000000000187	1,999999999999849
5,96046E-8	2,000000000000000	2,000000000038290	1,99999999987398	2,000000000061467	1,99999999979760
2,98023E-8	2,000000000000000	2,000000000239945	1,99999999971072	2,000000000385196	1,99999999953558
1,49012E-8	2,000000000000000	1,99999999631571	2,00000000042736	1,99999999408540	2,000000000710747

Tabela E.16: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com as integrações analítica e regra do retângulo

Δx	pL_{Em}	pE_{Em} Fonte analítico	pU_{Em} Fonte analítico	pE_{Em} Fonte numérico	pU_{Em} Fonte numérico
0,5	2,00000000000000				
0,25	2,00000000000000	1,85145283928212		1,41405562974865	
0,125	2,00000000000000	1,95842360079072	1,81246145073738	1,85045083380473	1,20393685742746
0,0625	2,00000000000000	1,98929118422954	1,94788155163625	1,96233883138039	1,80972116955841
0,03125	2,00000000000000	1,99730246824107	1,98660414081948	1,99056626519916	1,95272175592051
0,01563	2,00000000000000	1,99932433595397	1,99662746066252	1,99764039269749	1,98819532292142
0,00781	2,00000000000000	1,99983100375209	1,99915538074974	1,99941002449611	1,99704971066275
0,00391	2,00000000000000	1,99995774592063	1,99978875223818	1,99985250151401	1,99926248188159
0,00195	2,00000000000000	1,99998943616653	1,99994718224750	1,99996312509030	1,99981562384673
9,76563E-4	2,00000000000000	1,99999735902203	1,99998679519858	1,99999078125456	1,99995390617251
4,88281E-4	2,00000000000000	1,99999933975428	1,99999669877694	1,99999769531251	1,99998847655630
2,44141E-4	2,00000000000000	1,9999983493849	1,9999917469282	1,9999942382806	1,99999711913990
1,2207E-4	2,00000000000000	1,9999995873462	1,9999979367312	1,9999985595701	1,9999927978503
6,10352E-5	2,00000000000000	1,9999998968365	1,9999994841827	1,9999996398925	1,9999981994626
3,05176E-5	2,00000000000000	1,9999999742091	1,99999998710457	1,9999999099731	1,9999995498657
1,52588E-5	2,00000000000000	1,9999999935523	1,9999999677614	1,9999999774933	1,9999998874664
7,62939E-6	2,00000000000000	1,9999999983881	1,9999999919404	1,9999999943733	1,99999999718666
3,8147E-6	2,00000000000000	1,9999999995970	1,9999999979851	1,9999999985933	1,99999999929667
1,90735E-6	2,00000000000000	1,9999999998993	1,9999999994963	1,9999999996483	1,9999999982417
9,53674E-7	2,00000000000000	1,9999999999748	1,9999999998741	1,9999999999120	1,9999999995604
4,76837E-7	2,00000000000000	1,9999999999935	1,9999999999685	1,9999999999778	1,9999999998901
2,38419E-7	2,00000000000000	1,9999999999988	1,9999999999918	1,9999999999950	1,9999999999721
1,19209E-7	2,00000000000000	2,00000000000082	1,9999999999957	2,00000000000101	1,9999999999900
5,96046E-8	2,00000000000000	2,00000000025670	1,9999999991553	2,00000000034352	1,99999999988684
2,98023E-8	2,00000000000000	2,00000000160857	1,9999999980607	2,00000000215278	1,99999999974043
1,49012E-8	2,00000000000000	1,99999999753007	2,00000000296807	1,99999999669445	2,00000000397223

Tabela E.17: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS}) com as integrações analítica e regra do retângulo

Δx	pL_{DDS}	pE_{DDS} Fonte analítico	pU_{DDS} Fonte analítico	pE_{DDS} Fonte numérico	pU_{DDS} Fonte numérico
0,5	2,00000000000000				
0,25	2,00000000000000	1,89942434885691		1,41728841825106	
0,125	2,00000000000000	1,97264861872531	1,87351184883786	1,85544672152610	1,20719556283140
0,0625	2,00000000000000	1,99300841602897	1,96575311137246	1,96384046113000	1,81611146156253
0,03125	2,00000000000000	1,99824221829837	1,99125674173387	1,99095743454192	1,95460986570518
0,01563	2,00000000000000	1,99955993225394	1,99780253389606	1,99773917009636	1,98868500507140
0,00781	2,00000000000000	1,99988994409815	1,99944990033667	1,99943478041295	1,99717322787614
0,00391	2,00000000000000	1,99997248358810	1,99986242918569	1,99985869434118	1,99929342962595
0,00195	2,00000000000000	1,99999312074473	1,99996560442656	1,99996467353759	1,99982336505882
9,76563E-4	2,00000000000000	1,99999828017666	1,99999140092725	1,99999116838141	1,99995584174276
4,88281E-4	2,00000000000000	1,99999957004357	1,99999785022060	1,99999779209517	1,99998896046557
2,44141E-4	2,00000000000000	1,99999989251086	1,99999946255445	1,99999944802378	1,99999724011826
1,2207E-4	2,00000000000000	1,99999997312771	1,99999986563857	1,99999986200594	1,99999931002968
6,10352E-5	2,00000000000000	1,99999999328193	1,99999996640964	1,99999996550149	1,99999982750743
3,05176E-5	2,00000000000000	1,99999999832048	1,99999999160241	1,99999999137537	1,99999995687686
1,52588E-5	2,00000000000000	1,99999999958012	1,99999999790060	1,99999999784384	1,99999998921921
7,62939E-6	2,00000000000000	1,99999999989503	1,99999999947515	1,99999999946096	1,99999999730480
3,8147E-6	2,00000000000000	1,99999999997376	1,99999999986879	1,99999999986524	1,99999999932620
1,90735E-6	2,00000000000000	1,99999999999344	1,99999999996720	1,99999999996631	1,99999999983155
9,53674E-7	2,00000000000000	1,99999999999836	1,99999999999180	1,99999999999157	1,99999999995789
4,76837E-7	2,00000000000000	1,99999999999956	1,99999999999795	1,99999999999784	1,99999999998948
2,38419E-7	2,00000000000000	1,99999999999990	1,99999999999945	1,99999999999948	1,99999999999730
1,19209E-7	2,00000000000000	2,000000000000130	1,99999999999943	2,000000000000243	1,99999999999849
5,96046E-8	2,00000000000000	2,00000000038727	1,99999999987264	2,000000000074912	1,99999999975354
2,98023E-8	2,00000000000000	2,00000000356454	1,99999999932818	2,000000000689520	1,99999999870042
1,49012E-8	2,00000000000000	2,00000000248772	2,00000000392348	2,00000000481222	2,00000000758953

Tabela E.18: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com as integrações analítica e regra do retângulo

Δx	pL_{DDS-2}	pE_{DDS-2} Fonte analítico	pU_{DDS-2} Fonte analítico	pE_{DDS-2} Fonte numérico	pU_{DDS-2} Fonte numérico
0,5	2,000000000000000				
0,25	2,000000000000000	1,95179648151270		1,58530007674695	
0,125	2,000000000000000	1,87925361048735	1,97796798424074	1,71767017945610	1,52342863065895
0,0625	2,000000000000000	1,78041937386506	1,91795554613870	1,64316532390386	1,75146645960649
0,03125	2,000000000000000	1,63703659469652	1,84368967978109	1,48813423697988	1,72237474409020
0,01563	2,000000000000000	1,46702706904687	1,72517716223431	1,32509752227223	1,58706274463538
0,00781	2,000000000000000	1,30528634620140	1,56744045000115	1,19467697795700	1,41873762603906
0,00391	2,000000000000000	1,18065176097963	1,39659119501923	1,10804015400470	1,26567044871003
0,00195	2,000000000000000	1,09952218565720	1,24808160296297	1,05717263442731	1,15355703706108
9,76563E-4	2,000000000000000	1,05244363988212	1,14201585533181	1,02944745170039	1,08330728164825
4,88281E-4	2,000000000000000	1,02695030129569	1,07659149875932	1,01494917785490	1,04350998061107
2,44141E-4	2,000000000000000	1,01366526435313	1,03986933509874	1,00753229652745	1,02225186526979
1,2207E-4	2,000000000000000	1,00688121303608	1,02035375687679	1,00378074813004	1,01125460503944
6,10352E-5	2,000000000000000	1,00345288681234	1,01028511799558	1,00189404596794	1,00566005164181
3,05176E-5	2,000000000000000	1,00172953059153	1,00517006967600	1,00094794372178	1,00283828732200
1,52588E-5	2,000000000000000	1,00086553924546	1,00259196999097	1,00047420239186	1,00142121841582
7,62939E-6	2,000000000000000	1,00043296338023	1,00129772604165	1,00023715887207	1,00071112907551
3,8147E-6	2,000000000000000	1,00021653016331	1,00064929919419	1,00011859386050	1,00035569465242
1,90735E-6	2,000000000000000	1,00010827720418	1,00032475875470	1,00005930053704	1,00017787987337
9,53674E-7	2,000000000000000	1,00005414163325	1,00016240668105	1,00002965117031	1,00008894807579
4,76837E-7	2,000000000000000	1,00002707157448	1,00008121016824	1,00001482581061	1,00004447607296
2,38419E-7	2,000000000000000	1,00001353597671	1,00004060679127	1,00000741296167	1,00002223854528
1,19209E-7	2,000000000000000	1,00000676803573	1,00002030382245	1,00000370649493	1,00001111939985
5,96046E-8	2,000000000000000	1,00000338402971	1,00001015201793	1,00000185325099	1,00000555973172
2,98023E-8	2,000000000000000	1,00000169201782	1,00000507603564	1,00000092662638	1,00000277987381
1,49012E-8	2,000000000000000	1,00000084600965	1,00000253802450	1,00000046331341	1,00000138993890

As Tabs. E.19 e E.20 mostram as ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para as variáveis I_{DDS} e I_{DDS-2} obtidas com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume e termo fonte integrado pela regra do retângulo.

Tabela E.19: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS}) com a forma de aplicar condições de contorno com meio-volume

Δx	pL_{DDS}	pE_{DDS} Fonte numérico	pU_{DDS} Fonte numérico
0,333333333333333	1,000000000000000		
0,111111111111111	1,000000000000000	1,73021303409082	
0,037037037037037	1,000000000000000	1,60760662717723	1,75357053892701
0,012345679012345	1,000000000000000	1,35459896420919	1,66984670392727
0,00411522633744856	1,000000000000000	1,15775299372703	1,42105256542581
0,00137174211248285	1,000000000000000	1,05932151412407	1,19916484578655
4,57247370827618E-4	1,000000000000000	1,02066578304299	1,07743322429393
1,52415790275873E-4	1,000000000000000	1,00699421113828	1,02734829609181
5,08052634252909E-5	1,000000000000000	1,00234339857123	1,00930182500948
1,69350878084303E-5	1,000000000000000	1,00078247548319	1,00312185369583
5,64502926947676E-6	1,000000000000000	1,00026097471021	1,00104300182593
1,88167642315892E-6	1,000000000000000	1,00008700820033	1,00034793303015
6,27225474386307E-7	1,000000000000000	1,00002900458176	1,00011600723753
2,09075158128769E-7	1,000000000000000	1,00000966839931	1,00003867236492
6,96917193762563E-8	1,000000000000000	1,0000032282259	1,00001289115343
2,32305731254188E-8	1,000000000000000	1,00000107427673	1,00000429709172

Tabela E.20: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma de aplicar condições de contorno com meio-volume

Δx	pL_{DDS-2}	pE_{DDS-2} Fonte numérico	pU_{DDS-2} Fonte numérico
0,3333333333333333	2,000000000000000		
0,1111111111111111	2,000000000000000	1,39299604318419	
0,0370370370370370	2,000000000000000	1,92707644579662	1,28771288900404
0,0123456790123457	2,000000000000000	1,98306043485361	1,91967587305898
0,00411522633744856	2,000000000000000	1,99506829706525	1,98153899631772
0,00137174211248285	2,000000000000000	1,99843239942879	1,99464609122099
4,57247370827618E-4	2,000000000000000	1,99948583565775	1,99830055036731
1,52415790275873E-4	2,000000000000000	1,99982953785220	1,99944285470220
5,08052634252909E-5	2,000000000000000	1,99994328202415	1,99981531783446
1,69350878084303E-5	2,000000000000000	1,99998110541826	1,99993855387897
5,64502926947676E-6	2,000000000000000	1,99999370307369	1,99997953068681
1,88167642315892E-6	2,000000000000000	1,99999790116540	1,99999317830950
6,27225474386307E-7	2,000000000000000	1,99999930040412	1,99999772626026
2,09075158128769E-7	2,000000000000000	1,99999976680341	1,99999924210417
6,96917193762563E-8	2,000000000000000	1,9999999225841	1,99999974737153
2,32305731254188E-8	2,000000000000000	1,99999997469228	1,99999991570417

As Tabs. E.21 e E.22 mostram as ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício e termo fonte integrado analiticamente. A última coluna destas tabelas mostram os valores da ordem efetiva obtidos por meio da solução analítica nodal.

Tabela E.21: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS}) com solução analítica e numérica

Δx	pL_{DDS}	pE_{DDS} Fonte analítico	pU_{DDS} Fonte analítico	pE_{DDS} Sol anal nodal
1,000000000000000	1,000000000000000			
0,3333333333333333	1,000000000000000	1,76175468482992		1,65913633133228
0,1111111111111111	1,000000000000000	1,96424132935071	1,73163050339601	1,18475793367612
0,0370370370370370	1,000000000000000	1,99585991561556	1,96018991871314	1,05794455076352
0,0123456790123457	1,000000000000000	1,99953782309369	1,99539886714868	1,01892274330056
0,00411522633744856	1,000000000000000	1,99994862009576	1,99948645716850	1,00626450884671
0,00137174211248285	1,000000000000000	1,99999429078926	1,99994291105766	1,00208340249833
4,57247370827618E-4	1,000000000000000	1,9999936563915	1,99999365643053	1,00069393851327
1,52415790275873E-4	1,000000000000000	1,9999992951541	1,99999929515458	1,00023125407985
5,08052634252909E-5	1,000000000000000	1,9999999216838	1,99999992168379	1,00007707815556
1,69350878084303E-5	1,000000000000000	1,9999999912982	1,99999999129820	1,00002569179656
5,64502926947676E-6	1,000000000000000	1,9999999990331	1,99999999903313	1,00000856399365
1,88167642315892E-6	1,000000000000000	1,9999999998926	1,99999999989257	1,00000285499620
6,27225474386307E-7	1,000000000000000	1,9999999999880	1,99999999998806	1,00000095216879
2,09075158128769E-7	1,000000000000000	2,00000000000006	1,99999999999865	1,00000029807250
6,96917193762563E-8	1,000000000000000	1,99999999999745	2,00000000000038	1,00000013181696
2,32305731254188E-8	1,000000000000000	2,00000000024866	1,99999999996604	0,999999955110979

Tabela E.22: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com solução analítica e numérica

Δx	pL_{DDS-2}	pE_{DDS-2} Fonte analítico	pU_{DDS-2} Fonte analítico	pE_{DDS-2} Sol anal nodal
1,000000000000000	2,000000000000000			
0,333333333333333	2,000000000000000	2,06763286282652		1,38957012787846
0,111111111111111	2,000000000000000	1,88632437736794	2,09100636495339	2,59790517806530
0,0370370370370370	2,000000000000000	1,71652617954175	1,91361368868618	2,17823655653934
0,0123456790123457	2,000000000000000	1,45955946199202	1,77123661711890	2,05723967487786
0,00411522633744856	2,000000000000000	1,22413652425426	1,52987631872175	2,01884524364609
0,00137174211248285	2,000000000000000	1,08881608380714	1,27706095917309	2,00625592924122
4,57247370827618E-4	2,000000000000000	1,03162922752312	1,11476067248310	2,00208245432466
1,52415790275873E-4	2,000000000000000	1,01079072380825	1,04169325154042	2,00069385167935
5,08052634252909E-5	2,000000000000000	1,00362536745313	1,01433120768421	2,00023155574306
1,69350878084303E-5	2,000000000000000	1,00121165430152	1,00482742789365	2,00008190166952
5,64502926947676E-6	2,000000000000000	1,00040424151712	1,00161482370234	2,00003407400388
1,88167642315892E-6	2,000000000000000	1,00013478686196	1,00053890902645	1,99986163422841
6,27225474386307E-7	2,000000000000000	1,00004493336582	1,00017970695789	1,99915903907004
2,09075158128769E-7	2,000000000000000	1,00001497827888	1,00005991016995	2,04528870236255
6,96917193762563E-8	2,000000000000000	1,00000499281410	1,00001997092911	1,86460622842598
2,32305731254188E-8	2,000000000000000	1,00000166427742	1,00000665707332	2,000000000000000

APÊNDICE F. Tabelas do capítulo 5: Equação de Advecção-Difusão

Neste apêndice constam as tabelas que representam os valores das figuras utilizadas pelo capítulo 5. As Tabs. F.1 a F.4 comparam quatro variáveis de interesse entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno. Mostram o tamanho dos volumes de controle (Δx) e os valores dos erros de discretização para cada forma estudada.

Tabela F.1: Comparação do erro da variável de interesse (T_{nod}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	T_{nod} Sem vol fict	T_{nod} Com vol fict	Δx	T_{nod} Com meio vol	Δx	T_{nod} Com esp zero
0,33333	0,06145	0,06145	0,5	0,20086	0,33333	0,06145
0,11111	0,00763	0,00763	0,25	0,0253	0,11111	0,00763
0,03704	8,54365E-4	8,54365E-4	0,125	0,00585	0,03704	8,54365E-4
0,01235	9,50036E-5	9,50036E-5	0,0625	0,00143	0,01235	9,50036E-5
0,00412	1,05569E-5	1,05569E-5	0,03125	3,57103E-4	0,00412	1,05569E-5
0,00137	1,173E-6	1,173E-6	0,01563	8,9175E-5	0,00137	1,173E-6
4,57247E-4	1,30333E-7	1,30333E-7	0,00781	2,22875E-5	4,57247E-4	1,30333E-7
1,52416E-4	1,44815E-8	1,44815E-8	0,00391	5,57147E-6	1,52416E-4	1,44815E-8
5,08053E-5	1,60905E-9	1,60905E-9	0,00195	1,39284E-6	5,08053E-5	1,60905E-9
1,69351E-5	1,78783E-10	1,78783E-10	9,76563E-4	3,48209E-7	1,69351E-5	1,78783E-10
5,64503E-6	1,98648E-11	1,98648E-11	4,88281E-4	8,70523E-8	5,64503E-6	1,98648E-11
1,88168E-6	2,2072E-12	2,2072E-12	2,44141E-4	2,17631E-8	1,88168E-6	2,2072E-12
6,27225E-7	2,45245E-13	2,45245E-13	1,2207E-4	5,44076E-9	6,27225E-7	2,45245E-13
2,09075E-7	2,72494E-14	2,72494E-14	6,10352E-5	1,36019E-9	2,09075E-7	2,72494E-14
6,96917E-8	3,02771E-15	3,02771E-15	3,05176E-5	3,40048E-10	6,96917E-8	3,02771E-15
2,32306E-8	3,36413E-16	3,36413E-16	1,52588E-5	8,50119E-11	2,32306E-8	3,36413E-16
			7,62939E-6	2,1253E-11		
			3,8147E-6	5,31325E-12		
			1,90735E-6	1,32831E-12		
			9,53674E-7	3,32078E-13		
			4,76837E-7	8,30195E-14		
			2,38419E-7	2,07549E-14		
			1,19209E-7	5,18872E-15		
			5,96046E-8	1,29718E-15		
			2,98023E-8	3,24295E-16		
			1,49012E-8	8,10737E-17		

As Tabs. F.5 a F.13 mostram os valores da ordem assintótica (pL) obtida *a priori* e das ordens efetiva (pE) e aparente (pU) do erro de discretização obtidas *a posteriori* para as quatro formas de aplicar as condições de contorno.

Tabela F.2: Comparação do erro da variável de interesse ($T_{m,ret}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	$T_{m,ret}$ Sem vol fict	$T_{m,ret}$ Com vol fict	Δx	$T_{m,ret}$ Com meio vol	Δx	$T_{m,ret}$ Com esp zero
0,33333	0,13286	0,13286	0,5	0,00572	0,33333	0,13286
0,11111	0,01457	0,01457	0,25	0,00394	0,11111	0,01457
0,03704	0,00162	0,00162	0,125	0,00108	0,03704	0,00162
0,01235	1,79679E-4	1,79679E-4	0,0625	2,76223E-4	0,01235	1,79679E-4
0,00412	1,99641E-5	1,99641E-5	0,03125	6,9371E-5	0,00412	1,99641E-5
0,00137	2,21823E-6	2,21823E-6	0,01563	1,73623E-5	0,00137	2,21823E-6
4,57247E-4	2,4647E-7	2,4647E-7	0,00781	4,34178E-6	4,57247E-4	2,4647E-7
1,52416E-4	2,73855E-8	2,73855E-8	0,00391	1,08552E-6	1,52416E-4	2,73855E-8
5,08053E-5	3,04284E-9	3,04284E-9	0,00195	2,71385E-7	5,08053E-5	3,04284E-9
1,69351E-5	3,38093E-10	3,38093E-10	9,76563E-4	6,78466E-8	1,69351E-5	3,38093E-10
5,64503E-6	3,75659E-11	3,75659E-11	4,88281E-4	1,69617E-8	5,64503E-6	3,75659E-11
1,88168E-6	4,17399E-12	4,17399E-12	2,44141E-4	4,24042E-9	1,88168E-6	4,17399E-12
6,27225E-7	4,63776E-13	4,63776E-13	1,2207E-4	1,0601E-9	6,27225E-7	4,63776E-13
2,09075E-7	5,15307E-14	5,15307E-14	6,10352E-5	2,65026E-10	2,09075E-7	5,15307E-14
6,96917E-8	5,72564E-15	5,72564E-15	3,05176E-5	6,62565E-11	6,96917E-8	5,72564E-15
2,32306E-8	6,36182E-16	6,36182E-16	1,52588E-5	1,65641E-11	2,32306E-8	6,36182E-16
			7,62939E-6	4,14103E-12		
			3,8147E-6	1,03526E-12		
			1,90735E-6	2,58815E-13		
			9,53674E-7	6,47037E-14		
			4,76837E-7	1,61759E-14		
			2,38419E-7	4,04398E-15		
			1,19209E-7	1,01099E-15		
			5,96046E-8	2,52749E-16		
			2,98023E-8	6,31872E-17		
			1,49012E-8	1,57968E-17		

Tabela F.3: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	E_m Sem vol fict	E_m Com vol fict	Δx	E_m Com meio vol	Δx	E_m Com esp zero
0,33333	0,11146	0,11146	0,5	0,06695	0,33333	0,32883
0,11111	0,01202	0,01202	0,25	0,01716	0,11111	0,03914
0,03704	0,00133	0,00133	0,125	0,00479	0,03704	0,00461
0,01235	1,47929E-4	1,47929E-4	0,0625	0,00127	0,01235	5,24582E-4
0,00412	1,6436E-5	1,6436E-5	0,03125	3,27141E-4	0,00412	5,8797E-5
0,00137	1,82621E-6	1,82621E-6	0,01563	8,30549E-5	0,00137	6,55247E-6
4,57247E-4	2,02913E-7	2,02913E-7	0,00781	2,09254E-5	4,57247E-4	7,28781E-7
1,52416E-4	2,25458E-8	2,25458E-8	0,00391	5,25175E-6	1,52416E-4	8,10027E-8
5,08053E-5	2,50509E-9	2,50509E-9	0,00195	1,3155E-6	5,08053E-5	9,0013E-9
1,69351E-5	2,78344E-10	2,78344E-10	9,76563E-4	3,29196E-7	1,69351E-5	1,00018E-9
5,64503E-6	3,09271E-11	3,09271E-11	4,88281E-4	8,23392E-8	5,64503E-6	1,11133E-10
1,88168E-6	3,43634E-12	3,43634E-12	2,44141E-4	2,05898E-8	1,88168E-6	1,23481E-11
6,27225E-7	3,81816E-13	3,81816E-13	1,2207E-4	5,14808E-9	6,27225E-7	1,37202E-12
2,09075E-7	4,2424E-14	4,2424E-14	6,10352E-5	1,2871E-9	2,09075E-7	1,52446E-13
6,96917E-8	4,71377E-15	4,71377E-15	3,05176E-5	3,21785E-10	6,96917E-8	1,69385E-14
2,32306E-8	5,23753E-16	5,23753E-16	1,52588E-5	8,04474E-11	2,32306E-8	1,88205E-15
			7,62939E-6	2,0112E-11		
			3,8147E-6	5,02802E-12		
			1,90735E-6	1,25701E-12		
			9,53674E-7	3,14252E-13		
			4,76837E-7	7,85631E-14		
			2,38419E-7	1,96408E-14		
			1,19209E-7	4,91019E-15		
			5,96046E-8	1,22755E-15		
			2,98023E-8	3,06887E-16		
			1,49012E-8	7,67218E-17		

Tabela F.4: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS-2}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	I_{DDS-2} Sem vol fict	I_{DDS-2} Com vol fict	Δx	I_{DDS-2} Com meio vol	Δx	I_{DDS-2} Com esp zero
0,33333	0,04269	0,04269	0,5	1,53392	0,33333	0,04269
0,11111	0,0119	0,0119	0,25	0,0592	0,11111	0,0119
0,03704	0,00276	0,00276	0,125	0,01131	0,03704	0,00276
0,01235	7,73186E-4	7,73186E-4	0,0625	0,0025	0,01235	7,73186E-4
0,00412	2,41036E-4	2,41036E-4	0,03125	5,8796E-4	0,00412	2,41036E-4
0,00137	7,84799E-5	7,84799E-5	0,01563	1,42716E-4	0,00137	7,84799E-5
4,57247E-4	2,59523E-5	2,59523E-5	0,00781	3,51597E-5	4,57247E-4	2,59523E-5
1,52416E-4	8,62768E-6	8,62768E-6	0,00391	8,7259E-6	1,52416E-4	8,62768E-6
5,08053E-5	2,87333E-6	2,87333E-6	0,00195	2,17352E-6	5,08053E-5	2,87333E-6
1,69351E-5	9,57491E-7	9,57491E-7	9,76563E-4	5,4239E-7	1,69351E-5	9,57491E-7
5,64503E-6	3,19132E-7	3,19132E-7	4,88281E-4	1,35474E-7	5,64503E-6	3,19132E-7
1,88168E-6	1,06374E-7	1,06374E-7	2,44141E-4	3,38531E-8	1,88168E-6	1,06374E-7
6,27225E-7	3,54575E-8	3,54575E-8	1,2207E-4	8,46134E-9	6,27225E-7	3,54575E-8
2,09075E-7	1,18191E-8	1,18191E-8	6,10352E-5	2,11509E-9	2,09075E-7	1,18191E-8
6,96917E-8	3,93971E-9	3,93971E-9	3,05176E-5	5,28743E-10	6,96917E-8	3,93971E-9
2,32306E-8	1,31324E-9	1,31324E-9	1,52588E-5	1,32182E-10	2,32306E-8	1,31324E-9
			7,62939E-6	3,3045E-11		
			3,8147E-6	8,2612E-12		
			1,90735E-6	2,06529E-12		
			9,53674E-7	5,16322E-13		
			4,76837E-7	1,2908E-13		
			2,38419E-7	3,22701E-14		
			1,19209E-7	8,06752E-15		
			5,96046E-8	2,01688E-15		
			2,98023E-8	5,0422E-16		
			1,49012E-8	1,26055E-16		

As Tabs. F.5 e F.6 mostram as ordens para a variável T_{nod} . As Tabs. F.7 e F.8 mostram as ordens para a variável de interesse $T_{m,rel}$. As Tabs. F.9 a F.11 mostram os resultados das ordens para a variável E_m . E, finalmente, as Tabs. F. 12 e F.13 mostram as ordens para a variável de interesse I_{DDS-2} .

Tabela F.5: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{nod}) com a forma com volume fictício

Δx	pL_{nod}	pE_{nod}	pU_{nod}
0,3333333333333333	2,000000000000000		
0,1111111111111111	2,000000000000000	1,89848147714928	
0,0370370370370370	2,000000000000000	1,99331401346653	1,88579619259551
0,0123456790123457	2,000000000000000	1,99928905236680	1,99256370897277
0,00411522633744856	2,000000000000000	1,99992138172741	1,99920997261766
0,00137174211248285	2,000000000000000	1,99999126925322	1,99991264531511
4,57247370827618E-4	2,000000000000000	1,99999902997399	1,99999029915731
1,52415790275873E-4	2,000000000000000	1,99999989222004	1,99999892219316
5,08052634252909E-5	2,000000000000000	1,9999998802446	1,9999988024448
1,69350878084303E-5	2,000000000000000	1,9999999866938	1,9999998669384
5,64502926947676E-6	2,000000000000000	1,9999999985215	1,9999999852154
1,88167642315892E-6	2,000000000000000	1,9999999998357	1,9999999983573
6,27225474386307E-7	2,000000000000000	1,9999999999817	1,99999999998175
2,09075158128769E-7	2,000000000000000	2,00000000000000	1,9999999999794
6,96917193762563E-8	2,000000000000000	2,00000000000265	1,9999999999966
2,32305731254188E-8	2,000000000000000	1,99999999987858	2,00000000001816

Tabela F.6: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (T_{nod}) com a forma com meio-volume

Δx	pL_{nod}	pE_{nod}	pU_{nod}
0,5000000000000000	2,0000000000000000		
0,2500000000000000	2,0000000000000000	2,98917423735627	
0,1250000000000000	2,0000000000000000	2,11330654546649	3,17413943130562
0,0625000000000000	2,0000000000000000	2,02659236765773	2,14042428059548
0,0312500000000000	2,0000000000000000	2,00654624988859	2,03317317051866
0,0156250000000000	2,0000000000000000	2,00163031229070	2,00817872067894
0,0078125000000000	2,0000000000000000	2,00040718924219	2,00203763635917
0,0039062500000000	2,0000000000000000	2,00010177303687	2,00050897070423
0,0019531250000000	2,0000000000000000	2,00002544174255	2,00012721530598
9,765625E-4	2,0000000000000000	2,00000636034085	2,00003180211632
4,8828125E-4	2,0000000000000000	2,00000159007929	2,00000795042220
2,44140625E-4	2,0000000000000000	2,0000039751945	2,00000198759887
1,220703125E-4	2,0000000000000000	2,00000009937984	2,00000049689930
6,103515625E-5	2,0000000000000000	2,00000002484496	2,00000012422480
3,0517578125E-5	2,0000000000000000	2,00000000621124	2,00000003105620
1,52587890625E-5	2,0000000000000000	2,00000000155281	2,00000000776405
7,62939453125E-6	2,0000000000000000	2,00000000038820	2,00000000194101
3,814697265625E-6	2,0000000000000000	2,00000000009705	2,00000000048525
1,9073486328125E-6	2,0000000000000000	2,00000000002426	2,00000000012131
9,5367431640625E-7	2,0000000000000000	2,00000000000607	2,00000000003033
4,76837158203125E-7	2,0000000000000000	2,00000000000144	2,00000000000761
2,38418579101563E-7	2,0000000000000000	2,00000000000040	2,00000000000179
1,19209289550781E-7	2,0000000000000000	2,00000000000060	2,00000000000033
5,96046447753906E-8	2,0000000000000000	1,99999999999689	2,00000000000183
2,98023223876953E-8	2,0000000000000000	2,00000000008022	1,99999999972645
1,49011611938477E-8	2,0000000000000000	1,99999999778273	2,00000000181671

Tabela F.7: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($T_{m,ret}$) com a forma com volume fictício

Δx	pL_{ret}	pE_{ret}	pU_{ret}
0,3333333333333333	2,0000000000000000		
0,1111111111111111	2,0000000000000000	2,01185230577213	
0,0370370370370370	2,0000000000000000	2,00095537796049	2,01320369949310
0,0123456790123457	2,0000000000000000	2,00010281671284	2,00106187845760
0,00411522633744856	2,0000000000000000	2,00001138405716	2,00011424498826
0,00137174211248285	2,0000000000000000	2,00000126440270	2,00001264900409
4,57247370827618E-4	2,0000000000000000	2,00000014048311	2,00000140489252
1,52415790275873E-4	2,0000000000000000	2,00000001560916	2,00000015609235
5,08052634252909E-5	2,0000000000000000	2,00000000173435	2,00000001734351
1,69350878084303E-5	2,0000000000000000	2,00000000019271	2,00000000192706
5,64502926947676E-6	2,0000000000000000	2,00000000002141	2,00000000021412
1,88167642315892E-6	2,0000000000000000	2,00000000000238	2,00000000002379
6,27225474386307E-7	2,0000000000000000	2,00000000000026	2,00000000000264
2,09075158128769E-7	2,0000000000000000	2,00000000000008	2,00000000000029
6,96917193762563E-8	2,0000000000000000	2,00000000000058	2,00000000000001
2,32305731254188E-8	2,0000000000000000	2,000000000000574	1,99999999999993

Tabela F.8: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse $(T_{m,ret})$ com a forma com meio-volume

Δx	pL_{ret}	pE_{ret}	pU_{ret}
0,5000000000000000	2,0000000000000000		
0,2500000000000000	2,0000000000000000		
0,1250000000000000	2,0000000000000000	1,86178803697671	
0,0625000000000000	2,0000000000000000	1,97233845242842	1,82194927165643
0,0312500000000000	2,0000000000000000	1,99342882299910	1,96519586828831
0,0156250000000000	2,0000000000000000	1,99837764563373	1,99177295306539
0,0078125000000000	2,0000000000000000	1,99959567299387	1,99797125602621
0,0039062500000000	2,0000000000000000	1,99989899685220	1,99949454142731
0,0019531250000000	2,0000000000000000	1,99997475412196	1,99987374295567
9,765625E-4	2,0000000000000000	1,99999368883724	1,99996844245816
4,8828125E-4	2,0000000000000000	1,99999842222848	1,99999211103441
2,44140625E-4	2,0000000000000000	1,99999960555832	1,99999802778484
1,220703125E-4	2,0000000000000000	1,99999990138965	1,99999950694785
6,103515625E-5	2,0000000000000000	1,99999997534742	1,99999987673707
3,0517578125E-5	2,0000000000000000	1,99999999383685	1,99999996918427
1,52587890625E-5	2,0000000000000000	1,99999999845921	1,99999999229607
7,62939453125E-6	2,0000000000000000	1,99999999961480	1,99999999807402
3,814697265625E-6	2,0000000000000000	1,99999999990370	1,99999999951850
1,9073486328125E-6	2,0000000000000000	1,99999999997593	1,99999999987963
9,5367431640625E-7	2,0000000000000000	1,99999999999396	1,99999999996991
4,76837158203125E-7	2,0000000000000000	1,99999999999885	1,99999999999233
2,38418579101563E-7	2,0000000000000000	2,000000000000073	1,99999999999823
1,19209289550781E-7	2,0000000000000000	2,000000000000706	1,99999999999862
5,96046447753906E-8	2,0000000000000000	2,000000000005377	1,99999999999149
2,98023223876953E-8	2,0000000000000000	1,99999999653807	2,00000000122567
1,49011611938477E-8	2,0000000000000000	2,00000002005183	1,99999998870015

Tabela F.9: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com volume fictício

Δx	pL_{Em}	pE_{Em}	pU_{Em}
0,3333333333333333	2,0000000000000000		
0,1111111111111111	2,0000000000000000	2,02701460950712	
0,0370370370370370	2,0000000000000000	2,00270566763579	2,02999810818328
0,0123456790123457	2,0000000000000000	2,00029838269729	2,00300602033793
0,00411522633744856	2,0000000000000000	2,00003312740459	2,00033153281719
0,00137174211248285	2,0000000000000000	2,00000368050095	2,00003680818382
4,57247370827618E-4	2,0000000000000000	2,0000040894058	2,00000408944496
1,52415790275873E-4	2,0000000000000000	2,0000004543779	2,00000045437842
5,08052634252909E-5	2,0000000000000000	2,00000000504864	2,00000005048644
1,69350878084303E-5	2,0000000000000000	2,00000000056096	2,00000000560960
5,64502926947676E-6	2,0000000000000000	2,00000000006233	2,00000000062329
1,88167642315892E-6	2,0000000000000000	2,00000000000693	2,000000000006925
6,27225474386307E-7	2,0000000000000000	2,00000000000077	2,000000000000770
2,09075158128769E-7	2,0000000000000000	2,00000000000014	2,00000000000085
6,96917193762563E-8	2,0000000000000000	2,00000000000071	2,00000000000007
2,32305731254188E-8	2,0000000000000000	2,000000000000697	1,99999999999993

Tabela F.10: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com meio-volume

Δx	pL_{Em}	pE_{Em}	pU_{Em}
0,5000000000000000	2,0000000000000000		
0,2500000000000000	2,0000000000000000	1,96421259043699	
0,1250000000000000	2,0000000000000000	1,84196768495123	2,00885686320131
0,0625000000000000	2,0000000000000000	1,91474319568814	1,81477079449846
0,0312500000000000	2,0000000000000000	1,95616126951618	1,90008066276595
0,0156250000000000	2,0000000000000000	1,97777685527856	1,94873169498293
0,0078125000000000	2,0000000000000000	1,98880996363671	1,97404179504355
0,0039062500000000	2,0000000000000000	1,99438490728732	1,98693714518072
0,0019531250000000	2,0000000000000000	1,99718736874319	1,99344710626452
9,765625E-4	2,0000000000000000	1,99859240430269	1,99671810905344
4,8828125E-4	2,0000000000000000	1,99929588099357	1,99835768310553
2,44140625E-4	2,0000000000000000	1,99964786006258	1,99917849735268
1,220703125E-4	2,0000000000000000	1,99982390990451	1,99958916245543
6,103515625E-5	2,0000000000000000	1,99991194991827	1,99979455965095
3,0517578125E-5	2,0000000000000000	1,99995597370035	1,99989727442858
1,52587890625E-5	2,0000000000000000	1,99997798653544	1,99994863586473
7,62939453125E-6	2,0000000000000000	1,99998899318904	1,99997431759493
3,814697265625E-6	2,0000000000000000	1,99999449657485	1,99998715871310
1,9073486328125E-6	2,0000000000000000	1,99999724828250	1,99999357933546
9,5367431640625E-7	2,0000000000000000	1,99999862414003	1,99999678966246
4,76837158203125E-7	2,0000000000000000	1,99999931206963	1,99999839482994
2,38418579101563E-7	2,0000000000000000	1,99999965603455	1,99999919741460
1,19209289550781E-7	2,0000000000000000	1,99999982801590	1,99999959870742
5,96046447753906E-8	2,0000000000000000	1,99999991399760	1,99999979935532
2,98023223876953E-8	2,0000000000000000	1,99999995771714	1,99999989942443
1,49011611938477E-8	2,0000000000000000	1,99999997437356	1,99999995216500

Tabela F.11: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com volume de espessura zero

Δx	pL_{Em}	pE_{Em}	pU_{Em}
0,3333333333333333	2,0000000000000000		
0,1111111111111111	2,0000000000000000	2,02701460950712	
0,0370370370370370	2,0000000000000000	2,00270566763579	2,02999810818328
0,0123456790123457	2,0000000000000000	2,00029838269729	2,00300602033793
0,00411522633744856	2,0000000000000000	2,00003312740459	2,00033153281719
0,00137174211248285	2,0000000000000000	2,00000368050095	2,00003680818382
4,57247370827618E-4	2,0000000000000000	2,00000040894058	2,00000408944496
1,52415790275873E-4	2,0000000000000000	2,00000004543779	2,00000045437842
5,08052634252909E-5	2,0000000000000000	2,00000000504864	2,00000005048644
1,69350878084303E-5	2,0000000000000000	2,00000000056096	2,00000000560960
5,64502926947676E-6	2,0000000000000000	2,00000000006233	2,00000000062329
1,88167642315892E-6	2,0000000000000000	2,00000000000693	2,000000000006925
6,27225474386307E-7	2,0000000000000000	2,00000000000077	2,000000000000770
2,09075158128769E-7	2,0000000000000000	2,00000000000014	2,000000000000085
6,96917193762563E-8	2,0000000000000000	2,00000000000071	2,000000000000007
2,32305731254188E-8	2,0000000000000000	2,000000000000697	1,999999999999993

Tabela F.12: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com volume fictício

Δx	pL_{DDS-2}	pE_{DDS-2}	pU_{DSS-2}
0,3333333333333333	2,000000000000000		
0,1111111111111111	2,000000000000000	1,16286203687647	
0,0370370370370370	2,000000000000000	1,32966293537102	1,10579303105979
0,0123456790123457	2,000000000000000	1,15863139118856	1,38837207632345
0,0041152263744856	2,000000000000000	1,06095049361134	1,19964630621249
0,00137174211248285	2,000000000000000	1,02138338394962	1,07945435602133
4,57247370827618E-4	2,000000000000000	1,00725411757491	1,02828410795336
1,52415790275873E-4	2,000000000000000	1,00243238852698	1,00964585051927
5,08052634252909E-5	2,000000000000000	1,00081240247708	1,00324022014719
1,69350878084303E-5	2,000000000000000	1,00027097974959	1,00108287234255
5,64502926947676E-6	2,000000000000000	1,00009034648020	1,00036126950118
1,88167642315892E-6	2,000000000000000	1,00003011770479	1,00012045787904
6,27225474386307E-7	2,000000000000000	1,00001003948066	1,00004015648469
2,09075158128769E-7	2,000000000000000	1,00000334652086	1,00001338592366
6,96917193762563E-8	2,000000000000000	1,00000111550999	1,00000446202219
2,32305731254188E-8	2,000000000000000	1,00000037183700	1,00000148734602

Tabela F.13: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com meio-volume

Δx	pL_{DDS-2}	pE_{DDS-2}	pU_{DSS-2}
0,500000000000000	2,000000000000000		
0,250000000000000	2,000000000000000	4,69550077767779	
0,125000000000000	2,000000000000000	2,38826974389042	4,94452796880497
0,062500000000000	2,000000000000000	2,17907991720705	2,44242613886766
0,031250000000000	2,000000000000000	2,08636601810872	2,20647566797930
0,015625000000000	2,000000000000000	2,04256710237115	2,10012830714190
0,007812500000000	2,000000000000000	2,02115480848480	2,04949831137000
0,003906250000000	2,000000000000000	2,01054855509343	2,02463891990465
0,001953125000000	2,000000000000000	2,00526749420756	2,01229610375135
9,765625E-4	2,000000000000000	2,00263210565483	2,00614275789752
4,8828125E-4	2,000000000000000	2,00131564931228	2,00307012486599
2,44140625E-4	2,000000000000000	2,00065772463633	2,00153475767023
1,220703125E-4	2,000000000000000	2,00032883742078	2,00076730374431
6,103515625E-5	2,000000000000000	2,00016441249950	2,00038363323726
3,0517578125E-5	2,000000000000000	2,00008220469871	2,00019181197716
1,52587890625E-5	2,000000000000000	2,00004110196181	2,00009590483037
7,62939453125E-6	2,000000000000000	2,00002055088404	2,00004795212590
3,814697265625E-6	2,000000000000000	2,00001027541781	2,00002397599066
1,9073486328125E-6	2,000000000000000	2,00000513770285	2,00001198797726
9,5367431640625E-7	2,000000000000000	2,00000256884991	2,00000599398412
4,76837158203125E-7	2,000000000000000	2,00000128442454	2,00000299699094
2,38418579101563E-7	2,000000000000000	2,00000064221225	2,00000149849511
1,19209289550781E-7	2,000000000000000	2,00000032110663	2,00000074924741
5,96046447753906E-8	2,000000000000000	2,00000016054796	2,00000037462618
2,98023223876953E-8	2,000000000000000	2,00000008061080	2,00000018719367
1,49011611938477E-8	2,000000000000000	2,00000003950783	2,00000009431179

APÊNDICE G. Tabelas do capítulo 6: Equação de Burgers

Neste apêndice constam as tabelas que representam os valores das figuras utilizadas pelo capítulo 6. As Tabs. G.1 a G.4 comparam quatro variáveis de interesse entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno. Mostram o tamanho dos volumes de controle (Δx) e os valores dos erros de discretização para cada forma estudada.

Tabela G.1: Comparação do erro da variável de interesse (u_{nod}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	u_{nod} Sem vol fict	u_{nod} Com vol fict	Δx	u_{nod} Com meio vol	Δx	u_{nod} Com esp zero
0,33333	0,18729	0,18729	0,5	0,09529	0,33333	0,18729
0,11111	0,01265	0,01265	0,25	0,03704	0,11111	0,01265
0,03704	0,00133	0,00133	0,125	0,00983	0,03704	0,00133
0,01235	1,47339E-4	1,47339E-4	0,0625	0,00247	0,01235	1,47339E-4
0,00412	1,63608E-5	1,63608E-5	0,03125	6,18435E-4	0,00412	1,63608E-5
0,00137	1,81774E-6	1,81774E-6	0,01562	1,54655E-4	0,00137	1,81774E-6
4,57247E-4	2,0197E-7	2,0197E-7	0,00781	3,86666E-5	4,57247E-4	2,0197E-7
1,52416E-4	2,2441E-8	2,2441E-8	0,00391	9,66684E-6	1,52416E-4	2,2441E-8
5,08053E-5	2,49345E-9	2,49345E-9	0,00195	2,41672E-6	5,08053E-5	2,49345E-9
1,69351E-5	2,7705E-10	2,7705E-10	9,76563E-4	6,04181E-7	1,69351E-5	2,7705E-10
5,64503E-6	3,07833E-11	3,07833E-11	4,88281E-4	1,51045E-7	5,64503E-6	3,07833E-11
1,88168E-6	3,42037E-12	3,42037E-12	2,44141E-4	3,77613E-8	1,88168E-6	3,42037E-12
6,27225E-7	3,80041E-13	3,80041E-13	1,2207E-4	9,44033E-9	6,27225E-7	3,80041E-13
2,09075E-7	4,22268E-14	4,22268E-14	6,10352E-5	2,36008E-9	2,09075E-7	4,22268E-14
6,96917E-8	4,69186E-15	4,69186E-15	3,05176E-5	5,90021E-10	6,96917E-8	4,69186E-15
2,32306E-8	5,21318E-16	5,21318E-16	1,52588E-5	1,47505E-10	2,32306E-8	5,21318E-16
			7,62939E-6	3,68763E-11		
			3,8147E-6	9,21907E-12		
			1,90735E-6	2,30477E-12		
			9,53674E-7	5,76192E-13		
			4,76837E-7	1,44048E-13		
			2,38419E-7	3,6012E-14		
			1,19209E-7	9,003E-15		
			5,96046E-8	2,25075E-15		
			2,98023E-8	5,62688E-16		
			1,49012E-8	1,40672E-16		

As Tabs. G.5 a G.12 mostram os valores da ordem assintótica (pL) obtida *a priori* e das ordens efetiva (pE) e aparente (pU) do erro de discretização obtidas *a posteriori* para as quatro formas de aplicar as condições de contorno e termo fonte integrado pela regra do retângulo, ou seja, termo fonte integrado numericamente.

Tabela G.2: Comparação do erro da variável de interesse ($u_{m,ret}$) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	$u_{m,ret}$ Sem vol fict	$u_{m,ret}$ Com vol fict	Δx	$u_{m,ret}$ Com meio vol	Δx	$u_{m,ret}$ Com esp zero
0,33333	0,24241	0,24241	0,5	0,04707	0,33333	0,24241
0,11111	0,01946	0,01946	0,25	0,00724	0,11111	0,01946
0,03704	0,00204	0,00204	0,125	0,00391	0,03704	0,00204
0,01235	2,24624E-4	2,24624E-4	0,0625	0,0011	0,01235	2,24624E-4
0,00412	2,49388E-5	2,49388E-5	0,03125	2,8372E-4	0,00412	2,49388E-5
0,00137	2,77073E-6	2,77073E-6	0,01562	7,14121E-5	0,00137	2,77073E-6
4,57247E-4	3,07856E-7	3,07856E-7	0,00781	1,78831E-5	4,57247E-4	3,07856E-7
1,52416E-4	3,42062E-8	3,42062E-8	0,00391	4,47266E-6	1,52416E-4	3,42062E-8
5,08053E-5	3,80069E-9	3,80069E-9	0,00195	1,11828E-6	5,08053E-5	3,80069E-9
1,69351E-5	4,22299E-10	4,22299E-10	9,76563E-4	2,79578E-7	1,69351E-5	4,22299E-10
5,64503E-6	4,69221E-11	4,69221E-11	4,88281E-4	6,9895E-8	5,64503E-6	4,69221E-11
1,88168E-6	5,21357E-12	5,21357E-12	2,44141E-4	1,74738E-8	1,88168E-6	5,21357E-12
6,27225E-7	5,79285E-13	5,79285E-13	1,2207E-4	4,36845E-9	6,27225E-7	5,79285E-13
2,09075E-7	6,4365E-14	6,4365E-14	6,10352E-5	1,09211E-9	2,09075E-7	6,4365E-14
6,96917E-8	7,15167E-15	7,15167E-15	3,05176E-5	2,73028E-10	6,96917E-8	7,15167E-15
2,32306E-8	7,9463E-16	7,9463E-16	1,52588E-5	6,8257E-11	2,32306E-8	7,9463E-16
			7,62939E-6	1,70642E-11		
			3,8147E-6	4,26606E-12		
			1,90735E-6	1,06652E-12		
			9,53674E-7	2,66629E-13		
			4,76837E-7	6,66572E-14		
			2,38419E-7	1,66643E-14		
			1,19209E-7	4,16607E-15		
			5,96046E-8	1,04152E-15		
			2,98023E-8	2,6038E-16		
			1,49012E-8	6,50949E-17		

Tabela G.3: Comparação do erro da variável de interesse (E_m) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	E_m Sem vol fict	E_m Com vol fict	Δx	E_m Com meio vol	Δx	E_m Com esp zero
0,33333	0,22101	0,22101	0,5	0,03176	0,33333	0,39457
0,11111	0,01691	0,01691	0,25	0,02611	0,11111	0,04314
0,03704	0,00175	0,00175	0,125	0,00922	0,03704	0,005
0,01235	1,92874E-4	1,92874E-4	0,0625	0,00257	0,01235	5,68444E-4
0,00412	2,14107E-5	2,14107E-5	0,03125	6,69532E-4	0,00412	6,37311E-5
0,00137	2,37872E-6	2,37872E-6	0,01562	1,70464E-4	0,00137	7,10346E-6
4,57247E-4	2,64299E-7	2,64299E-7	0,00781	4,2978E-5	4,57247E-4	7,90111E-7
1,52416E-4	2,93665E-8	2,93665E-8	0,00391	1,07883E-5	1,52416E-4	8,78213E-8
5,08053E-5	3,26294E-9	3,26294E-9	0,00195	2,70246E-6	5,08053E-5	9,75908E-9
1,69351E-5	3,62549E-10	3,62549E-10	9,76563E-4	6,76282E-7	1,69351E-5	1,08438E-9
5,64503E-6	4,02833E-11	4,02833E-11	4,88281E-4	1,69153E-7	5,64503E-6	1,20489E-10
1,88168E-6	4,47592E-12	4,47592E-12	2,44141E-4	4,22987E-8	1,88168E-6	1,33877E-11
6,27225E-7	4,97324E-13	4,97324E-13	1,2207E-4	1,0576E-8	6,27225E-7	1,48752E-12
2,09075E-7	5,52583E-14	5,52583E-14	6,10352E-5	2,64415E-9	2,09075E-7	1,65281E-13
6,96917E-8	6,13981E-15	6,13981E-15	3,05176E-5	6,61059E-10	6,96917E-8	1,83645E-14
2,32306E-8	6,82201E-16	6,82201E-16	1,52588E-5	1,65267E-10	2,32306E-8	2,0405E-15
			7,62939E-6	4,13171E-11		
			3,8147E-6	1,03293E-11		
			1,90735E-6	2,58233E-12		
			9,53674E-7	6,45584E-13		
			4,76837E-7	1,61396E-13		
			2,38419E-7	4,0349E-14		
			1,19209E-7	1,00873E-14		
			5,96046E-8	2,52182E-15		
			2,98023E-8	6,30454E-16		
			1,49012E-8	1,57613E-16		

Tabela G.4: Comparação do erro da variável de interesse (I_{DDS-2}) entre as quatro formas de aplicar as condições de contorno

Δx	I_{DDS-2} Sem vol fict	I_{DDS-2} Com vol fict	Δx	I_{DDS-2} Com meio vol	Δx	I_{DDS-2} Com esp zero
0,33333	0,41927	0,41927	0,5	1,11164	0,33333	0,41927
0,11111	0,02847	0,02847	0,25	0,10127	0,11111	0,02847
0,03704	0,00439	0,00439	0,125	0,02226	0,03704	0,00439
0,01235	9,50234E-4	9,50234E-4	0,0625	0,00522	0,01235	9,50234E-4
0,00412	2,60625E-4	2,60625E-4	0,03125	0,00127	0,00412	2,60625E-4
0,00137	8,0654E-5	8,0654E-5	0,01562	3,12581E-4	0,00137	8,0654E-5
4,57247E-4	2,61938E-5	2,61938E-5	0,00781	7,76207E-5	4,57247E-4	2,61938E-5
1,52416E-4	8,65451E-6	8,65451E-6	0,00391	1,93408E-5	1,52416E-4	8,65451E-6
5,08053E-5	2,87631E-6	2,87631E-6	0,00195	4,82724E-6	5,08053E-5	2,87631E-6
1,69351E-5	9,57822E-7	9,57822E-7	9,76563E-4	1,20582E-6	1,69351E-5	9,57822E-7
5,64503E-6	3,19169E-7	3,19169E-7	4,88281E-4	3,01331E-7	5,64503E-6	3,19169E-7
1,88168E-6	1,06378E-7	1,06378E-7	2,44141E-4	7,53172E-8	1,88168E-6	1,06378E-7
6,27225E-7	3,5458E-8	3,5458E-8	1,2207E-4	1,88274E-8	6,27225E-7	3,5458E-8
2,09075E-7	1,18192E-8	1,18192E-8	6,10352E-5	4,7066E-9	2,09075E-7	1,18192E-8
6,96917E-8	3,93971E-9	3,93971E-9	3,05176E-5	1,17662E-9	6,96917E-8	3,93971E-9
2,32306E-8	1,31324E-9	1,31324E-9	1,52588E-5	2,94151E-10	2,32306E-8	1,31324E-9
			7,62939E-6	7,35374E-11		
			3,8147E-6	1,83843E-11		
			1,90735E-6	4,59606E-12		
			9,53674E-7	1,14902E-12		
			4,76837E-7	2,87254E-13		
			2,38419E-7	7,18134E-14		
			1,19209E-7	1,79534E-14		
			5,96046E-8	4,48834E-15		
			2,98023E-8	1,12208E-15		
			1,49012E-8	2,80521E-16		

A Tab. G.5 mostra as ordens obtidas com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício, mas o mesmo resultado é verificado com as formas sem volume fictício e com volume de espessura zero e a Tab. G.6 mostra os resultados das ordens obtidas com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume.

Tabela G.5: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (u_{nod}) com a forma com volume fictício

Δx	pL_{nod}	pE_{nod} Fonte numérico	pU_{nod} Fonte numérico
0,3333333333333333	2,000000000000000		
0,1111111111111111	2,000000000000000	2,45317465262878	
0,0370370370370370	2,000000000000000	2,04780930823578	2,49093332598021
0,0123456790123457	2,000000000000000	2,00512106464860	2,05297458650728
0,00411522633744856	2,000000000000000	2,00056702029548	2,00568832395652
0,00137174211248285	2,000000000000000	2,00006297837903	2,00063000101228
4,57247370827618E-4	2,000000000000000	2,00000699730382	2,00006997571085
1,52415790275873E-4	2,000000000000000	2,00000077747458	2,00000777477874
5,08052634252909E-5	2,000000000000000	2,00000008638602	2,00000086386060
1,69350878084303E-5	2,000000000000000	2,00000000959845	2,00000009598447
5,64502926947676E-6	2,000000000000000	2,00000000106649	2,00000001066494
1,88167642315892E-6	2,000000000000000	2,00000000011850	2,000000000118499
6,27225474386307E-7	2,000000000000000	2,00000000001316	2,000000000013167
2,09075158128769E-7	2,000000000000000	2,00000000000137	2,000000000001463
6,96917193762563E-8	2,000000000000000	2,000000000000079	2,000000000000144
2,32305731254188E-8	2,000000000000000	2,00000000138341	1,99999999982796

Tabela G.6: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (u_{nod}) com a forma com meio-volume

Δx	pL_{nod}	pE_{nod} Fonte numérico	pU_{nod} Fonte numérico
0,5000000000000000	2,0000000000000000		
0,2500000000000000	2,0000000000000000	1,36332311999912	
0,1250000000000000	2,0000000000000000	1,91437127385097	1,09805705907945
0,0625000000000000	2,0000000000000000	1,99158837591452	1,88747526309648
0,0312500000000000	2,0000000000000000	1,99825211596655	1,9893566606765
0,0156250000000000	2,0000000000000000	1,99956848120456	1,99781288533878
0,0078125000000000	2,0000000000000000	1,99989218882238	1,99946055176876
0,0039062500000000	2,0000000000000000	1,99997304731339	1,99986523431351
0,0019531250000000	2,0000000000000000	1,99999326177031	1,99996630905618
9,765625E-4	2,0000000000000000	1,99999831543794	1,99999157720788
4,8828125E-4	2,0000000000000000	1,99999957885918	1,99999789429712
2,44140625E-4	2,0000000000000000	1,99999989471478	1,99999947357395
1,220703125E-4	2,0000000000000000	1,9999997367869	1,9999986839347
6,103515625E-5	2,0000000000000000	1,9999999341967	1,9999996709837
3,0517578125E-5	2,0000000000000000	1,9999999835492	1,9999999177459
1,52587890625E-5	2,0000000000000000	1,9999999958873	1,9999999794365
7,62939453125E-6	2,0000000000000000	1,9999999989718	1,9999999948591
3,814697265625E-6	2,0000000000000000	1,9999999997430	1,9999999987148
1,9073486328125E-6	2,0000000000000000	1,9999999999357	1,9999999996787
9,5367431640625E-7	2,0000000000000000	1,9999999999840	1,9999999999197
4,76837158203125E-7	2,0000000000000000	1,9999999999959	1,9999999999800
2,38418579101563E-7	2,0000000000000000	1,9999999999932	1,9999999999968
1,19209289550781E-7	2,0000000000000000	1,9999999999864	1,9999999999954
5,96046447753906E-8	2,0000000000000000	2,00000000003988	1,99999999998490
2,98023223876953E-8	2,0000000000000000	1,99999999992109	2,00000000007948
1,49011611938477E-8	2,0000000000000000	1,99999998642995	2,000000000441814

A Tab. G.7 mostra as ordens obtidas com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício, mas o mesmo resultado é verificado com as formas sem volume fictício e com volume de espessura zero e a Tab. G.8 mostra os resultados das ordens obtidas com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume.

Tabela G.7: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse ($u_{m,ret}$) com a forma com volume fictício

Δx	pL_{ret}	pE_{ret} Fonte numérico	pU_{ret} Fonte numérico
0,3333333333333333	2,0000000000000000		
0,1111111111111111	2,0000000000000000	2,29586139597032	
0,0370370370370370	2,0000000000000000	2,05484854767918	2,32027058926392
0,0123456790123457	2,0000000000000000	2,00636236623191	2,06068576129296
0,00411522633744856	2,0000000000000000	2,00071039445572	2,00706578385536
0,00137174211248285	2,0000000000000000	2,00007897581513	2,00078928329717
4,57247370827618E-4	2,0000000000000000	2,00000877562310	2,00008775036330
1,52415790275873E-4	2,0000000000000000	2,0000097507581	2,00000975068564
5,08052634252909E-5	2,0000000000000000	2,00000010834184	2,00000108341748
1,69350878084303E-5	2,0000000000000000	2,0000001203798	2,00000012037982
5,64502926947676E-6	2,0000000000000000	2,00000000133755	2,00000001337554
1,88167642315892E-6	2,0000000000000000	2,00000000014862	2,00000000148617
6,27225474386307E-7	2,0000000000000000	2,00000000001650	2,00000000016513
2,09075158128769E-7	2,0000000000000000	2,00000000000174	2,00000000001834
6,96917193762563E-8	2,0000000000000000	1,99999999998734	2,00000000000354
2,32305731254188E-8	2,0000000000000000	2,00000000057397	1,99999999991401

Tabela G.8: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse $(u_{m,ret})$ com a forma com meio-volume

Δx	pL_{ret}	pE_{ret} Fonte numérico	pU_{ret} Fonte numérico
0,5000000000000000	2,0000000000000000		
0,2500000000000000	2,0000000000000000		
0,1250000000000000	2,0000000000000000	0,890910571885296	
0,0625000000000000	2,0000000000000000	1,82331966929520	0,251982679378118
0,0312500000000000	2,0000000000000000	1,96000198284012	1,77285005516429
0,0156250000000000	2,0000000000000000	1,99022522297679	1,94969205999353
0,0078125000000000	2,0000000000000000	1,99756972167288	1,98776319449882
0,0039062500000000	2,0000000000000000	1,99939325890031	1,99696102204017
0,0019531250000000	2,0000000000000000	1,99984836634824	1,99924150324147
9,765625E-4	2,0000000000000000	1,99996209481105	1,99981045354011
4,8828125E-4	2,0000000000000000	1,99999052390422	1,99995261823918
2,44140625E-4	2,0000000000000000	1,99999763098865	1,99998815486312
1,220703125E-4	2,0000000000000000	1,99999940774795	1,99999703873474
6,103515625E-5	2,0000000000000000	1,99999985193704	1,99999925968487
3,0517578125E-5	2,0000000000000000	1,99999996298426	1,99999981492129
1,52587890625E-5	2,0000000000000000	1,99999999074607	1,99999995373033
7,62939453125E-6	2,0000000000000000	1,99999999768652	1,99999998843258
3,814697265625E-6	2,0000000000000000	1,99999999942163	1,99999999710815
1,9073486328125E-6	2,0000000000000000	1,99999999985541	1,99999999927704
9,5367431640625E-7	2,0000000000000000	1,99999999996386	1,99999999981926
4,76837158203125E-7	2,0000000000000000	1,99999999999097	1,99999999995482
2,38418579101563E-7	2,0000000000000000	1,99999999999647	1,99999999999813
1,19209289550781E-7	2,0000000000000000	2,00000000000176	1,99999999999471
5,96046447753906E-8	2,0000000000000000	2,00000000013057	1,99999999999582
2,98023223876953E-8	2,0000000000000000	2,00000000012462	2,00000000013255
1,49011611938477E-8	2,0000000000000000	1,99999996906398	2,00000001047816

A Tab. G.9 mostra as ordens obtidas com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício, mas o mesmo resultado é verificado com as formas sem volume fictício e com volume de espessura zero e a Tab. G.10 mostra os resultados das ordens obtidas com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume.

Tabela G.9: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com volume fictício

Δx	pL_{Em}	pE_{Em} Fonte numérico	pU_{Em} Fonte numérico
0,3333333333333333	2,0000000000000000		
0,1111111111111111	2,0000000000000000	2,33952721409957	
0,0370370370370370	2,0000000000000000	2,06458809610153	2,36651904972148
0,0123456790123457	2,0000000000000000	2,00753746221281	2,07141084123787
0,0041152263744856	2,0000000000000000	2,00084220407248	2,00837005073350
0,00137174211248285	2,0000000000000000	2,00009363683761	2,00093572088390
4,57247370827618E-4	2,0000000000000000	2,00001040481730	2,00010404017126
1,52415790275873E-4	2,0000000000000000	2,00000115609975	2,00001156089873
5,08052634252909E-5	2,0000000000000000	2,00000012845564	2,00000128455517
1,69350878084303E-5	2,0000000000000000	2,00000001427285	2,000000014272849
5,64502926947676E-6	2,0000000000000000	2,00000000158587	2,00000001585872
1,88167642315892E-6	2,0000000000000000	2,00000000017621	2,000000000176208
6,27225474386307E-7	2,0000000000000000	2,00000000001956	2,000000000019579
2,09075158128769E-7	2,0000000000000000	2,00000000000206	2,000000000002175
6,96917193762563E-8	2,0000000000000000	1,99999999998526	2,000000000000416
2,32305731254188E-8	2,0000000000000000	2,000000000066857	1,999999999989985

Tabela G.10: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (E_m) com a forma com meio-volume

Δx	pL_{Em}	pE_{Em} Fonte numérico	pU_{Em} Fonte numérico
0,5000000000000000	2,0000000000000000		
0,2500000000000000	2,0000000000000000	0,282992314709520	
0,1250000000000000	2,0000000000000000	1,50117698675882	1,57736967837234
0,0625000000000000	2,0000000000000000	1,84428907951637	1,34333733473482
0,0312500000000000	2,0000000000000000	1,93958242587139	1,80912751150433
0,0156250000000000	2,0000000000000000	1,97369052479491	1,92774511715884
0,0078125000000000	2,0000000000000000	1,98779188000726	1,96890542743003
0,0039062500000000	2,0000000000000000	1,99413060255630	1,98566122572761
0,0019531250000000	2,0000000000000000	1,99712380603164	1,99312882529125
9,765625E-4	2,0000000000000000	1,99857651446613	1,99663860652902
4,8828125E-4	2,0000000000000000	1,99929190858701	1,99833781472186
2,44140625E-4	2,0000000000000000	1,99964686696423	1,99917353108682
1,220703125E-4	2,0000000000000000	1,99982366163012	1,99958792098799
6,103515625E-5	2,0000000000000000	1,99991188784969	1,99979424929618
3,0517578125E-5	2,0000000000000000	1,99995595818321	1,99989719684138
1,52587890625E-5	2,0000000000000000	1,99997798265616	1,99994861646811
7,62939453125E-6	2,0000000000000000	1,99998899221921	1,99997431274580
3,814697265625E-6	2,0000000000000000	1,99999449633239	1,99998715750082
1,9073486328125E-6	2,0000000000000000	1,99999724822189	1,99999357903239
9,5367431640625E-7	2,0000000000000000	1,99999862412487	1,99999678958669
4,76837158203125E-7	2,0000000000000000	1,99999931206592	1,99999839481097
2,38418579101563E-7	2,0000000000000000	1,99999965603330	1,99999919741007
1,19209289550781E-7	2,0000000000000000	1,99999982801809	1,99999959870503
5,96046447753906E-8	2,0000000000000000	1,99999991406260	1,99999979933658
2,98023223876953E-8	2,0000000000000000	1,99999995705581	1,99999989973153
1,49011611938477E-8	2,0000000000000000	1,99999996572548	1,99999995416591

A Tab. G.11 mostra as ordens obtidas com a forma de aplicar as condições de contorno com volume fictício, mas o mesmo resultado é verificado com as formas sem volume fictício e com volume de espessura zero e a Tab. G.12 mostra os resultados das ordens obtidas com a forma de aplicar as condições de contorno com meio-volume.

Tabela G.11: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com volume fictício

Δx	pL_{DDS-2}	pE_{DDS-2} Fonte numérico	pU_{DDS-2} Fonte numérico
0,3333333333333333	2,0000000000000000		
0,1111111111111111	2,0000000000000000	2,44840022712738	
0,0370370370370370	2,0000000000000000	1,70226055723142	2,53674190558460
0,0123456790123457	2,0000000000000000	1,39230208889254	1,77214947845251
0,00411522633744856	2,0000000000000000	1,17750767066383	1,46188415441619
0,00137174211248285	2,0000000000000000	1,06763412395319	1,22274845904637
4,57247370827618E-4	2,0000000000000000	1,02369705525417	1,08803433960126
1,52415790275873E-4	2,0000000000000000	1,00803694682163	1,03132616196228
5,08052634252909E-5	2,0000000000000000	1,00269470634768	1,01068459762887
1,69350878084303E-5	2,0000000000000000	1,00089999777333	1,00358940844295
5,64502926947676E-6	2,0000000000000000	1,00030019564029	1,00119960247621
1,88167642315892E-6	2,0000000000000000	1,00010008705484	1,00040021694130
6,27225474386307E-7	2,0000000000000000	1,00003336477922	1,00013344452459
2,09075158128769E-7	2,0000000000000000	1,00001112186284	1,00004448582977
6,96917193762563E-8	2,0000000000000000	1,00000370731759	1,00001482909016
2,32305731254188E-8	2,0000000000000000	1,00000123577586	1,00000494308342

Tabela G.12: Ordens assintótica, efetiva e aparente do erro de discretização para a variável de interesse (I_{DDS-2}) com a forma com meio-volume

Δx	pL_{DDS-2}	pE_{DDS-2} Fonte numérico	pU_{DDS-2} Fonte numérico
0,5000000000000000	2,0000000000000000		
0,2500000000000000	2,0000000000000000	3,45643542081712	
0,1250000000000000	2,0000000000000000	2,18593554367370	3,67666001989324
0,0625000000000000	2,0000000000000000	2,09183637133950	2,21358754310037
0,0312500000000000	2,0000000000000000	2,04201473542952	2,10745644876792
0,0156250000000000	2,0000000000000000	2,01995034482034	2,04916279786158
0,0078125000000000	2,0000000000000000	2,00971438084870	2,02331597449787
0,0039062500000000	2,0000000000000000	2,00479252752342	2,01134404821233
0,0019531250000000	2,0000000000000000	2,00238015700992	2,00559399149161
9,765625E-4	2,0000000000000000	2,00118605843992	2,00277753463190
4,8828125E-4	2,0000000000000000	2,00059202497986	2,00138390698422
2,44140625E-4	2,0000000000000000	2,00029576152359	2,00069073896257
1,220703125E-4	2,0000000000000000	2,00014781803171	2,00034506591388
6,103515625E-5	2,0000000000000000	2,00007389333476	2,00017245707294
3,0517578125E-5	2,0000000000000000	2,00003694274728	2,00008620956644
1,52587890625E-5	2,0000000000000000	2,00001847039364	2,00004310004083
7,62939453125E-6	2,0000000000000000	2,00000923495182	2,00002154883483
3,814697265625E-6	2,0000000000000000	2,00000461741466	2,00001077412102
1,9073486328125E-6	2,0000000000000000	2,00000230869202	2,00000538698641
9,5367431640625E-7	2,0000000000000000	2,00000115434218	2,00000269347468
4,76837158203125E-7	2,0000000000000000	2,00000057717014	2,00000134673271
2,38418579101563E-7	2,0000000000000000	2,00000028858413	2,00000067336544
1,19209289550781E-7	2,0000000000000000	2,00000014429062	2,00000033668196
5,96046447753906E-8	2,0000000000000000	2,00000007218082	2,00000016832722
2,98023223876953E-8	2,0000000000000000	2,00000003624199	2,00000008416043
1,49011611938477E-8	2,0000000000000000	2,00000000565401	2,00000004643799